



Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt

Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5836

Berechnung und experimentelle Verifizierung von Materialaktivierungen in D-T Fusionsreaktoren

S. Kelzenberg

Institut für Materialforschung
Projekt Kernfusion

November 1996

Forschungszentrum Karlsruhe
Technik und Umwelt
Wissenschaftliche Berichte
FZKA 5836

Berechnung und experimentelle Verifizierung von
Materialaktivierungen in D-T Fusionsreaktoren

Stefan Kelzenberg

Institut für Materialforschung
Projekt Kernfusion

Von der Fakultät für Physik
der Universität Karlsruhe genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe
1996

**Als Manuskript gedruckt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor**

**Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Postfach 3640, 76021 Karlsruhe**

ISSN 0947-8620

Zusammenfassung

Zur Untersuchung der neutroneninduzierten Radioaktivität und zur Berechnung radiologischer Größen wie Aktivität, γ -Dosisrate, Nachzerfallswärme, Inkorporations- und Inhalationsdosis von Materialien sind Aktivierungsrechnungen ein wichtiges Hilfsmittel. Solche Berechnungen sind mit Hilfe existierender Programmpakete wie dem europäischen Aktivierungssystem (EASY) mit dem europäischen Referenzprogramm FISPACT und dem Europäischen Aktivierungsfile (EAF) möglich. Dabei wurden bisher nur die neutroneninduzierten Reaktionen berücksichtigt. In dieser Arbeit wird dargestellt, wie mit Hilfe des im Institut für Materialforschung I im Forschungszentrum Karlsruhe entwickelten Programms PCROSS und der drei zusätzlichen Datenbibliotheken KFKSPEC, KFKSTOPP und KFKXN auch die Reaktionen der durch die Neutronenwechselwirkung entstehenden, geladenen Teilchen, der sogenannten sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen, mit in die Rechnungen einbezogen werden können. Auf diese Weise wurden die Auswirkungen der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen auf die Aktivierbarkeit der 81 stabilen Elemente des Periodensystems untersucht, mit dem Ergebnis, daß sich bei 31 Elementen ein Zuwachs von mindestens 10 % in einer der oben genannten radiologischen Größen zeigte. Die größten Effekte ergaben sich für die Elemente Fluor, Natrium, Vanadin und Gold.

Wichtig für die Materialentwicklung ist heute neben anderen Auswahlkriterien die Vorhersage des radiologischen Verhaltens von Werkstoffen unter fusionstypischen Bedingungen. Deshalb wurden mit den selben Programmen Aktivierungsrechnungen für eine Reihe interessierender Werkstoffgruppen durchgeführt. Zu ihnen gehören Stähle, Vanadinlegierungen, Titanlegierungen und Keramiken. Ihre Vor- und Nachteile werden unter radiologischen Gesichtspunkten diskutiert. Die Untersuchungsergebnisse zeigten auch, daß nicht nur die Legierungselemente sondern auch die Verunreinigungen berücksichtigt werden müssen, um ein realitätsnahes Bild der erzeugten Radioaktivität und des Abklingverhaltens zu erhalten. In einigen Fällen wie den Vanadinlegierungen wird das radiologische Langzeitverhalten sogar von den Verunreinigungen dominiert.

Um die rechnerisch erzielten Ergebnisse zu untermauern, wurden an einer neuinstallierten Bestrahlungseinrichtung am Karlsruher Isochron-Zyklotron integrale Aktivierungsexperimente für Fluor, Vanadin, Chrom und Eisen durchgeführt. Damit konnten die Auswirkungen der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen bestätigt werden. Die Ergebnisse dienen außerdem dazu, Wirkungsquerschnitte aus der Datenbibliothek EAF (European Activation File) zu überprüfen.

Abstract

Computation and Experimental Verification of Activation of Materials in D-T-Fusion Reactors

Activation calculations are an important tool for the investigation of materials behaviour under neutron irradiation and allow to calculate the neutron-induced activity, γ -dose rate, decay heat, ingestion and inhalation dose. Such calculations can be done with the European Activation System (EASY) consisting of the two main parts, the European reference code FISPACT and the European Activation File (EAF). Up to now only the neutron-induced reactions were considered. This work shows, how sequential reactions of charged particles, which are produced by neutron-induced reactions, can be included with the help of the computer code PCROSS and the three additional data libraries KFKSPEC, KFKSTOPP and KFKXN, recently developed in the Institut für Materialforschung I / Forschungszentrum Karlsruhe. Using this programme package the effect of the sequential charged particle reactions on the activation behaviour of the 81 stable elements of the periodic system has been investigated. The results show for 31 elements an increase of at least 10 % for at least one of the above mentioned radiological quantities. The largest effects have been found for the elements fluorine, sodium, vanadium and gold.

The prediction of the radiological behaviour under fusion-like irradiation conditions is a very important requirement for materials development in general. Therefore, activation calculations have been performed for some candidate materials out of four classes of materials: steels, vanadium alloys, titanium alloys and ceramics. Their radiological performance is discussed in a comparative way. The investigations have shown that not only the alloying elements but also impurity elements have to be taken into account and can in some cases like vanadium alloys even dominate the long-term activation.

In order to confirm the calculated radioactivity, the elements fluorine, vanadium, chromium and iron have been irradiated in a newly-installed facility at the Karlsruhe Isochronous cyclotron, where neutrons with a "white" spectrum up to 50 MeV can be generated. The effect of the sequential charged particle reactions has been demonstrated. In addition, the results were used to check some reaction cross sections used in the European Activation File.

1. Einleitung	1
2. Das europäische Aktivierungssystem	3
2.1 Das Computerprogramm FISPACT	4
2.1.1 Berechnung des Inventars	4
2.1.2 Weitere radiologische Größen	5
2.2 Die Datenbibliotheken	6
2.3 Das Neutronenspektrum	7
3. Die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen	9
3.1 Das Computerprogramm PCROSS	10
3.2 Die benötigten Kerndaten	11
3.3 Die Erstellung der neuen Datenbibliotheken	13
3.3.1 Kernmodelle und verwendetes Computerprogramm	13
3.3.2 Die Bibliothek KFKSPEC	13
3.3.3 Die Bibliothek KFKXN	15
3.3.4 Die Bibliothek KFKSTOPP	15
3.4 Weiterentwicklung der drei KFK-Bibliotheken	16
4. Durchführung und Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen	18
4.1 Der Effekt der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen	20
4.1.1 Aktivität	21
4.1.2 Nachzerfallswärme	23
4.1.3 γ -Dosisrate	25
4.1.4 Inkorporations- und Inhalationsdosis	28
4.1.5 Vergleich der Einzelergebnisse	31
4.2 Bewertung von Strukturmaterialien unter radiologischen Gesichtspunkten	35
4.2.1 Überblick über die verschiedenen Werkstoffgruppen	36
4.2.1.1 Titanlegierungen	37
4.2.1.2 Vanadinlegierungen	38
4.2.1.3 Stähle	39
4.2.1.4 Keramiken	40
4.2.2 Entwicklung neuer Legierungen	42
4.2.3 Die Bedeutung von Verunreinigungen	46
4.2.4 Ausblick	50
5. Integrale Aktivierungsexperimente an V, Cr und Fe	51
5.1 Aufbau des Aktivierungsexperimentes	51
5.2 Auswertung der γ -Spektren	52
5.2.1 Energieeichung und Nachweiswahrscheinlichkeit	52
5.2.2 Suche nach Peaks	55
5.2.3 Anfangsaktivität	58
5.2.4 Halbwertszeitberechnung	58
5.2.5 Statistische und systematische Fehler	59
5.3 Durchführung und Ergebnisse des Experiments	60
5.3.1 Ergebnisse der Bestrahlung von Vanadin	61
5.3.2 Ergebnisse der Bestrahlung von Chrom	63
5.3.3 Ergebnisse der Bestrahlung von Eisen	66
5.4 Vergleich des experimentellen mit dem rechnerisch bestimmten Anfangsinventar.	71
5.4.1 Berechnung des Neutronenspektrums	71
5.4.2 Vergleich der Ergebnisse	73
5.4.3 Datenunsicherheit am Beispiel Teflon	78

6. Zusammenfassung und Ausblick	79
Anhang A. Die Datenstrukturen GAM-II und VITAMIN-J	81
Anhang B. Liste der verwendeten Abkürzungen	86
Literaturverzeichnis	87
Danksagung	92
Lebenslauf	93

Abbildungsverzeichnis

Abbildung	1. Schematische Darstellung der Belastung der ersten Wand	2
Abbildung	2. Neutronenspektrum der Zone 12 (erste Wand) des EEF Referenzreaktors.	8
Abbildung	3. Datenbeispiel aus der Bibliothek KFKSPEC	14
Abbildung	4. Datenbeispiel aus der Bibliothek KFKXN	15
Abbildung	5. Datenbeispiel aus der Bibliothek KFKSTOPP	16
Abbildung	6. Statistischer Vergleich der Datenbibliotheken KFKSPEC und EAF	16
Abbildung	7. Ablaufschema der Aktivierungsrechnungen	19
Abbildung	8. Darstellung der Ergebnisse für Vanadin und Fluor	34
Abbildung	9. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für einige wichtige Elemente	36
Abbildung	10. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für Titan und drei seiner Legierungen	38
Abbildung	11. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für Vanadin und zwei seiner Legierungen	39
Abbildung	12. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für Eisen und drei seiner Legierungen	40
Abbildung	13. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für Siliziumkarbid, OPTIFER I und eine Vanadinlegierung	41
Abbildung	14. Vergleich der Dosisraten von V-5Ti-5Cr mit und ohne Verunreinigungen	49
Abbildung	15. Schematische Darstellung der Anordnung von Target und Probe	52
Abbildung	16. Verlauf der Nachweiswahrscheinlichkeit	54
Abbildung	17. Beispiel für ein Spektrum	56
Abbildung	18. Auszug aus dem Analyseergebnis für obiges Spektrum	57
Abbildung	19. Neutronenspektrum von 54 MeV Deuteronen an Beryllium	72

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1.	Kinematisch mögliche Kernreaktionen in einem Z-A-Feld	9
Tabelle 2.	Statistischer Vergleich der Datenbibliotheken	16
Tabelle 3.	Abklingzeiten	20
Tabelle 4.	Beispiel zu den Ergebnistabellen	21
Tabelle 5.	Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die Aktivität	22
Tabelle 6.	Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die Nachzerfallswärme	23
Tabelle 7.	Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die γ -Dosisrate	25
Tabelle 8.	Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die Inkorporationsdosis	29
Tabelle 9.	Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die Inhalationsdosis	30
Tabelle 10.	Übersicht über den Effekt der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen	32
Tabelle 11.	Die wichtigsten radioaktiven Isotope	33
Tabelle 12.	Zusammensetzung der drei Legierungen Manet II, CeTa und OPTIFER I	43
Tabelle 13.	Nachzerfallswärme für reines Eisen und die Legierungen Manet II und OPTIFER I	44
Tabelle 14.	γ -Dosisrate für reines Eisen und die Legierungen Manet II und OPTIFER I	45
Tabelle 15.	γ -Dosisraten für alle stabilen Elemente von H - Bi	47
Tabelle 16.	Erlaubte maximale Konzentrationen wichtiger Verunreinigungen	48
Tabelle 17.	Geschätzte Konzentration von Verunreinigungen in einem hochreinen Stahl	50
Tabelle 18.	Auszug aus der chemischen Analyse des Stahls F82H mod.	50
Tabelle 19.	Auszug aus chemischen Analysen von Vanadinproben	50
Tabelle 20.	Benutzte Eichquellen	53
Tabelle 21.	Beispiel zur Bestimmung der Halbwertszeit	59
Tabelle 22.	Strahlzeiten für das Experiment	60
Tabelle 23.	Übersicht über die nachgewiesenen Nuklide für Vanadin	61
Tabelle 24.	Ergebnisse der Bestrahlung von Vanadin	62
Tabelle 25.	Übersicht über die nachgewiesenen Nuklide für Chrom	64
Tabelle 26.	Ergebnisse der Bestrahlung von Chrom	64
Tabelle 27.	Übersicht über die nachgewiesenen Nuklide für Eisen	67
Tabelle 28.	Ergebnisse der Bestrahlung von Eisen	71
Tabelle 29.	Radioaktives Inventar in Vanadin	74
Tabelle 30.	Radioaktives Inventar in Chrom	76
Tabelle 31.	Radioaktives Inventar in Eisen	77
Tabelle 32.	Die Datenstruktur GAM-II	81
Tabelle 33.	Die Datenstruktur VITAMIN-J	82

1. Einleitung

Die Idee eines Fusionsreaktors ist bestechend: Ein Stück Sonne, die größte Energiequelle unseres Sonnensystems, hier auf der Erde nachzubauen und als Energiequelle verfügbar zu machen. Die wissenschaftliche und technische Herausforderung, die in einem solchen Projekt steckt, ist enorm und allein schon deshalb interessant. Die Verfügbarkeit von Wasserstoff, dem Brennstoff eines Fusionsreaktors, ist im Gegensatz zu fossilen Energieträgern oder Uran praktisch unbegrenzt. Da das Produkt der Fusionsreaktion Helium ist, findet kein Ausstoß von Kohlendioxid oder anderen Treibhausgasen wie bei der Verbrennung von fossilen Energieträgern statt, und anders als bei der Kernspaltung werden durch den Fusionsprozeß selbst keine radioaktiven Nuklide erzeugt. Auf Grund dieser Vorteile wurden bereits in den sechziger Jahren Überlegungen für den Bau von Fusionsreaktoren angestellt. Dabei wurden die Schwierigkeiten jedoch unterschätzt, und die zeitlichen Vorstellungen haben sich als unrealistisch erwiesen. Andererseits hat sich an der grundlegenden Idee wenig geändert.

Die Bedingungen, unter denen die Fusion in der Sonne abläuft, sind in erster Linie Temperaturen von mehreren Millionen Kelvin und Drücke von einigen 10^{15} Pascal. Annähernd vergleichbare Bedingungen lassen sich aber auf der Erde kaum realisieren. Da aber in der Sonne verschiedene Fusionsreaktionen ablaufen, ist die erste Frage, welche der Reaktionen sich am ehesten auf der Erde verwirklichen lassen. Maßgeblich dafür ist, unter welchen Bedingungen ein fortlaufender Prozeß möglich ist. Die Wahl fiel schließlich auf die Reaktion, bei der aus einem Deuteron und einem Triton ein α -Teilchen und ein Neutron entstehen. Dabei wird eine Energie von 18 MeV pro Reaktion freigesetzt, die in Form von kinetischer Energie auf die Reaktionsprodukte verteilt wird. Der Prozeß findet unter Bedingungen statt, bei denen das Deuterium und das Tritium nur noch als Plasma, d.h. vollständig ionisiert, vorliegen. Da kein Festkörper den Kontakt mit einem Plasma aushält, wird der Brennstoff von starken Magnetfeldern eingeschlossen. Es sind verschiedene Reaktortypen möglich; favorisiert werden Reaktoren vom Tokamak-Typ, bei denen die Magnetfelder einen Ring bilden, in dessen Innerem das Plasma kreist.

Die Verwirklichung eines Fusionsreaktors erfordert Neuerungen und Verbesserungen auf vielen Gebieten der Technik. Die Anforderungen, die an die verschiedenen Komponenten gestellt werden, gehen oft weit über die Anforderungen bei anderen Anwendungen hinaus. Am Anfang steht dabei die Suche nach geeigneten Werkstoffen. Im Institut für Materialforschung (IMF) ist ein Schwerpunkt die Suche nach Materialien für die Strukturen der ersten Wand des Plasmabehälters und des anschließenden Blankets, in dem das Tritium erbrütet werden soll. Diese beiden Komponenten des Reaktors gehören zu den am höchsten belasteten. Die erste Wand ist der thermischen Strahlung des Plasmas ausgesetzt. Störungen im Fluß des Plasmas führen zu Plasmaabbrissen. Zusammen ergibt das hohe thermische und mechanische Belastungen für das Material. Abbildung 1 auf Seite 2 zeigt schematisch die Belastungen der ersten Wand.

Ein weiteres Problem stellen die aus der Fusion stammenden Neutronen dar. Da es sich hierbei um neutrale Teilchen handelt, werden sie nicht durch die Magnetfelder eingeschlossen, sondern verlassen das Plasma weitgehend ungehindert und treffen mit einer Energie von 14,5 MeV auf die erste Wand. Dort und im dahinterliegenden Blanket lösen sie eine Fülle von Kernreaktionen und Veränderungen in der Struktur des Materials aus. Während die Neutronen im Blanket zum Erbrüten des Tritium benötigt werden, stellen die Veränderungen in den Strukturmaterialien ein großes Problem dar. Durch Zusammenstöße der Neutronen mit den Atomkernen des Materials verlassen die Kerne ihre Plätze im Kristallgitter, durch Kernreaktionen entstehen Wasserstoff und Helium sowie radioaktive Nuklide. Die Auswirkungen sind je nach Material und je nach dem Gewicht der einzelnen Faktoren unterschiedlich. So führen Wasserstoff und Helium im allgemeinen zu einer Versprödung des Materials. Schäden im Kristallgitter können aber auch dazu führen, daß das Material seine Festigkeit verliert und anfängt zu kriechen. Ziel der

Suche sind Werkstoffe, die den Belastungen möglichst lange standhalten, und deren Entsorgung keine zusätzlichen Probleme schafft. Es wäre ein seltener Zufall gewesen, gäbe es bereits ein Material, das alle diese Anforderungen erfüllt. Stattdessen ist es vielmehr so, daß gerade die Entwicklung neuer Werkstoffe sehr viel Zeit in Anspruch nimmt, was nicht zuletzt durch die umfangreichen und zeitaufwendigen Tests, die gerade bei hochbelasteten Komponenten nötig sind, verursacht wird.

Ausgangspunkt der Entwicklung waren Strukturmaterialien, die beim Bau von Kernspaltungsreaktoren Verwendung finden, da dies aus kernphysikalischer Sicht die am nächsten verwandte Anwendung ist. Das Hauptproblem bei der Übernahme von Ergebnissen aus dem Bereich der Kernspaltungstechnik ist, daß sich die Energieverteilung der Neutronen aus einem Spaltreaktor wesentlich von der unterscheidet, die bei einem Fusionsreaktor erwartet wird. Ein typisches Neutronenspektrum eines Spaltreaktors hat sein Maximum bei zwei bis drei MeV und fällt zu höheren Energien hin stark ab. Dagegen liegt das Maximum des Neutronenspektrums aus der Fusion an seinem Ende bei 14,5 MeV. Die Unterschiede im Spektrum haben zur Folge, daß durch die höheren Energien zusätzliche Reaktionen möglich werden, und sich dadurch die Bedeutung der verschiedenen Kernreaktionen verändert. Um aber verschiedene Werkstoffe unter kernphysikalischen Gesichtspunkten zu bewerten, und die weitere Entwicklung zu lenken, müssen Vorhersagen über die Aktivierbarkeit der Materialien erstellt werden. Zur Beurteilung des Materials werden eine Reihe von radiologischen Größen herangezogen, wie die Aktivität, die γ -Dosisrate, die Nachwärme, die Radiotoxizität und die Transmutationsraten. Mit Hilfe von Computerprogrammen und umfangreichen Datenbibliotheken können die genannten Größen berechnet werden. Die Qualität der Rechnungen hängt dabei entscheidend von der Qualität und dem Umfang der Datenbibliotheken ab. In Europa wurde dazu das European Activation System (EASY) erstellt. Es umfaßt das Programm FISPACT und die Da-

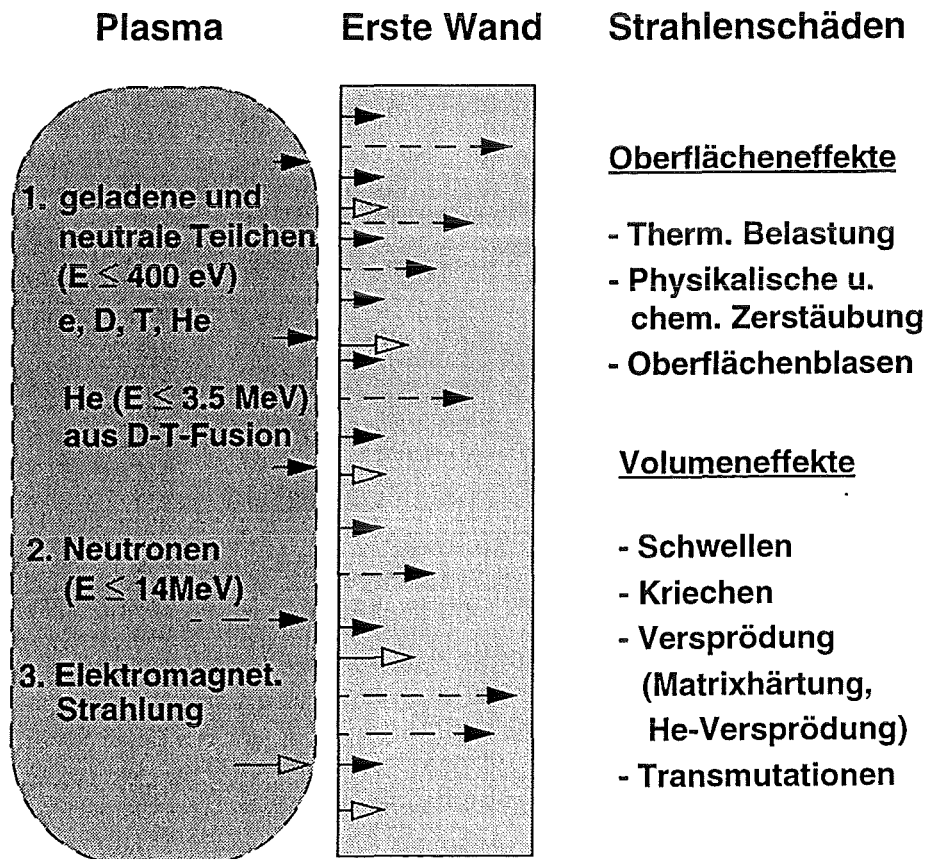


Abbildung 1. Schematische Darstellung der Belastung der ersten Wand: Sie umhüllt das heiße Plasma.

tenbibliothek European Activation File (EAF), die in Kapitel 2 beschrieben werden, sowie das Programm PCROSS und die dazugehörigen Bibliotheken KFKSPEC, KFKXN und KFKSTOPP, die im IMF entwickelt wurden und in Kapitel 3 vorgestellt werden.

Das Programm FISPACT und die EAF-Bibliothek wurden entwickelt, um neutroneninduzierte Kernreaktionen und ihre Auswirkungen auf die Aktivierung von Materialien zu berechnen. Durch die neutroneninduzierten Reaktionen entstehen aber auch geladene Teilchen, wie Protonen (p), Deuteronen (d), Tritonen (t), Helium-3- (h) und α -Teilchen (α), die ihrerseits wieder Kernreaktionen auslösen können. Dieser Typ von Reaktionen wird als sequentielle Reaktionen geladener Teilchen bezeichnet. Sie wurden bisher in den Aktivierungsrechnungen nicht berücksichtigt mit der Begründung, daß die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen gegenüber den primären Neutronenreaktionen wegen der niedrigeren Teilchenflüsse vernachlässigbar sind. Nachdem aber in Einzelfällen nachgewiesen werden konnte, daß das Argument keine Allgemeingültigkeit besitzt [1]-[3], ergab sich die Notwendigkeit einer systematischen Untersuchung des Phänomens. Dazu wurde im IMF das Programm PCROSS und die drei dazugehörigen Datenbibliotheken KFKSPEC, KFKXN und KFKSTOPP entwickelt. Mit dem Programm PCROSS werden Pseudowirkungsquerschnitte errechnet, die die sequentiellen Reaktionen der geladenen Teilchen beschreiben und dann als zusätzliche Eingabedaten für FISPACT dienen. Im Rahmen dieser Dissertation wurde das Programm PCROSS weiterentwickelt und die Datenbibliotheken erweitert. Der Schwerpunkt lag jedoch auf der systematischen Untersuchung der Auswirkungen der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen auf das Aktivierungsverhalten der stabilen chemischen Elemente. Dabei zeigte sich bei 31 von 81 zu untersuchenden Elementen eine Zunahme von mindestens 10 % in wenigstens einer der oben genannten radiologischen Größen. Die detaillierten Ergebnisse werden in Kapitel 4 dargestellt.

Ein großer Teil der Daten, die für die eben genannten Rechnungen benötigt wurden, stammt nicht von Experimenten, sondern aus Rechnungen mit theoretischen Modellen. Sie sind deshalb mit relativ großen Unsicherheiten behaftet. Um diese Unsicherheiten in einigen wichtigen Fällen einzugrenzen, wurden mit Vanadin, Chrom und Eisen integrale Aktivierungsexperimente durchgeführt und die entstandene Radioaktivität gemessen. Die Aktivierungsexperimente bilden den zweiten Schwerpunkt dieser Arbeit. Sie werden zusammen mit den Ergebnissen in Kapitel 5 beschrieben. In einer abschließenden Zusammenfassung werden die Ergebnisse bewertet und ein kurzer Ausblick gegeben.

2. Das europäische Aktivierungssystem

Durch die Zusammenarbeit von AEA Industrial Technology Harwell, AEA Fusion Culham, beide Großbritannien und ECN Petten, Niederlande entstanden im Rahmen des europäischen Forschungsprogramms über niedrigaktivierende Werkstoffe für die Fusion mehrere umfangreiche Datenbibliotheken sowie das Computerprogramm FISPACT. Zusammen bilden sie ein komplettes Paket zur Berechnung von Materialaktivierungen in intensiven Neutronenfeldern. Wegen der Bedeutung des sorgfältigen Zusammenfügens von Datenbibliotheken und Programm gleichen Entwicklungsstandes wurde beschlossen diese auch als komplettes Paket zu verteilen. Dieses Paket, das europäische Aktivierungssystem, EASY [4], ist Grundlage und Ausgangspunkt für die in dieser Arbeit beschriebenen Ergebnisse. Deshalb soll im folgenden auf die einzelnen Bestandteile des Pakets eingegangen werden.

2.1 Das Computerprogramm FISPACT

Das Kernstück des europäischen Aktivierungssystems ist das Computerprogramm FISPACT [5], [6]. Es wurde entwickelt zur Berechnung der Veränderungen der Zusammensetzung von Materialien bei der Aktivierung durch Neutronen, wie sie für die Fusion typisch ist, und ist eine Weiterentwicklung des Computerprogramms FISPIN [7]. FISPIN dient dazu, den Abbrand der Brennstäbe und die Veränderungen des Strukturmaterials in einem Kernspaltungsreaktor zu berechnen.

Um die Veränderung des Inventars - der Anzahl der Kerne für jedes vorkommende Nuklid - zu ermitteln, benutzt das Computerprogramm FISPACT Datenbibliotheken mit Reaktionsquerschnitten und Zerfallsdaten für alle relevanten Nuklide, die durch die Bestrahlung mit Neutronen entstehen können. Als weitere Eingabe benötigt FISPACT die Angabe eines Neutronenspektrums. Der eigentliche Rechenvorgang wird durch die Eingabe von Schlüsselwörtern gesteuert, die zusätzliche Informationen enthalten über die Bestrahlungsdauer und -intensität, die Abklingzeit und die anfängliche Menge und Zusammensetzung des zu untersuchenden Materials. Mit Hilfe des Inventars werden weitere radiologische Größen bestimmt. Die Ausgabe enthält für jedes Nuklid folgende Angaben:

- Menge des Nuklids in Anzahl der Atomkerne und in Gramm (Inventar)
- Aktivität in Becquerel
- Leistung der α -, β - und γ -Strahlung in Kilowatt
- Oberflächen- γ -Dosisrate in Sievert pro Stunde
- Inkorporations- und Inhalationsdosis in Sievert
- Halbwertszeiten

Daraus ergeben sich für jedes Element Inventar und Strahlungsleistung durch Summation über die jeweiligen Nuklide. Für das gesamte Material werden angegeben:

- die Gesamtaktivität,
- die Nachzerfallswärme getrennt nach Zerfallsarten und insgesamt,
- die Gesamtinkorporations- und -inhalationsdosen sowie
- die effective A_2 Transportgrenze, entsprechend den internationalen Regeln für den Transport radioaktiver Stoffe.

Desweiteren wird ein γ -Spektrum in 22 Energiegruppen berechnet und für die verschiedenen radiologischen Größen werden Listen mit den wichtigsten Isotopen erstellt. Zusätzlich können Datensätze produziert werden, mit deren Hilfe die Aktivität, die Dosisrate, die Nachwärme sowie die Inkorporations- und Inhalationsdosen als Funktionen der Abklingzeit grafisch dargestellt werden können.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Aktivierungsrechnungen für alle stabilen Elemente von Wasserstoff (H, $Z = 1$) bis Wismut (Bi, $Z = 83$) durchgeführt. Die Elemente Technetium (Tc, $Z = 43$) und Promethium (Pm, $Z = 61$) wurden nicht berücksichtigt, da sie keine stabilen Isotope besitzen. Außerdem wurden Eisen- und Vanadiumbasislegierungen untersucht, um Vorhersagen über ihre Langzeitaktivierungseigenschaften zu erhalten. Die Ergebnisse werden in Kapitel 4 dargestellt.

Neben den Aktivierungsrechnungen bietet FISPACT noch die Möglichkeiten, Sensitivitätsbetrachtungen und Pfadanalysen durchzuführen [8].

2.1.1 Berechnung des Inventars

Der erste Schritt einer Aktivierungsrechnung ist die Bestimmung des Inventars, d.h. die Bestimmung der Veränderung der Zusammensetzung des Materials durch Transmutation

und Zerfall. Dazu muß für jedes vorhandene oder entstehende Nuklid folgende Differentialgleichung gelöst werden:

$$\frac{dN_i}{dt} = -(\lambda_i + \sigma_i \Phi)N_i + \sum_j (\lambda_{ij} + \sigma_{ij} \Phi)N_j$$

Dabei bedeutet:

N_i = Zahl der Atome des Nuklids i zur Zeit t

λ_i = Zerfallskonstante des Nuklids i (1/s)

λ_{ij} = Zerfallskonstante des Nuklids j , das nach i zerfällt (1/s)

σ_i = totaler Wirkungsquerschnitt für die Reaktionen des Nuklids i (cm²)

σ_{ij} = Wirkungsquerschnitt für Neutronenreaktionen, die das Nuklid j in das Nuklid i überführen (cm²)

Φ = Neutronenfluß (cm⁻²s⁻¹)

Der erste Teil der Gleichung beschreibt den Verlust an Kernen des Nuklids i durch Zerfall, falls das Nuklid instabil ist, und durch Transmutationen, d.h. Kernreaktionen, deshalb das Minuszeichen. Der zweite Teil der Gleichung gibt die Neubildung des Nuklids durch Zerfall anderer Nuklide und durch Kernreaktionen wieder. Damit erhält man einen Satz gekoppelter, linearer Differentialgleichungen erster Ordnung. Ein solches System ist analytisch nicht lösbar, deshalb müssen numerische Verfahren angewandt werden. Im Fall von FISPACT wird ein Verfahren angewendet, daß bereits in FISPIN Verwendung fand und auf einer Methode basiert, die von J. Sidell entwickelt wurde [9]. Er benutzte anstelle einer Taylor-Entwicklung bis zur ersten Ordnung folgende Lösung:

$$N_i(t+h) = N_i(t) \times \exp(-(\lambda_i + \sigma_i \Phi)h) + \sum_j (\lambda_{ij} + \sigma_{ij} \Phi)N_j \times \frac{1 - \exp(-(\lambda_i + \sigma_i \Phi)h)}{\lambda_i + \sigma_i \Phi}$$

Dabei ist h der Parameter für die Länge des Zeitschritts. Mit dem Bruch am Ende der Gleichung wird daraus eine effektive Zeit. Für kurzlebige Isotope, kurzlebig im Vergleich zur Bestrahlungs- oder Abklingzeit, wird der erste Teil der Gleichung mit Null gleichgesetzt, da fast alle existierenden Kerne zerfallen. Mit diesem Ansatz wird die Zahl der benötigten Zeitschritte stark reduziert. Vergleiche mit anderen Verfahren ergaben eine zufriedenstellende Übereinstimmung [7].

2.1.2 Weitere radiologische Größen

Die Aktivität $A_i(t)$ für das Nuklid i zum Zeitpunkt t ergibt sich als Produkt aus dem Inventar $N_i(t)$ und der Zerfallskonstante λ_i . Die Strahlungsleistung erhält man, indem man die Aktivität mit der Energie der α -, β - oder γ -Strahlung multipliziert.

Eine weitere wichtige Größe ist die γ -Dosisrate. Damit ist hier die Äquivalentdosisrate oder Äquivalentdosisleistung von γ -Strahlung an der ebenen Oberfläche einer unendlich ausgedehnten Schicht des betreffenden Materials gemeint. Da der Qualitätsfaktor für γ -Strahlung gleich eins ist, ist die Äquivalentdosisrate gleich der Energiedosisrate. Zur Berechnung der Energiedosisrate benutzt FISPACT folgende Näherungsformel, die auch von Jarvis [10] und Giancarli [11] angewendet wurde:

$$\frac{dD}{dt} = 5,76 \times 10^{-10} \frac{\mu_a S_V B}{2\mu_m}$$

$\frac{dD}{dt}$ = Energiedosisrate (Gy/h)

μ_a = Absorptionskoeffizient für γ -Strahlung in Luft (m²/kg)

μ_m = Absorptionskoeffizient für γ -Strahlung im zu untersuchenden Material (m²/kg)

B = Dosisaufbaufaktor (gleich 2 gesetzt)
 $S_V = \gamma$ -Strahlungsleistung (MeV/kg/s)

Die Strahlungsleistung ergibt sich als:

$$S_V = E_\gamma \gamma_r A_i(t)$$

E_γ = Energie der γ -Quanten (MeV)
 γ_r = relative Häufigkeit von γ -Quanten der Energie E_γ pro Zerfall
 $A_i(t)$ = spezifische Aktivität des Nuklids i zum Zeitpunkt t (Bq/kg)

Dabei werden nur γ -Quanten mit einer Energie von mehr als 100 keV berücksichtigt. Diese Beschränkung ist sinnvoll, weil Röntgen- und γ -Strahlung mit geringerer Energie ebenso wie α - und β -Strahlung leicht abgeschirmt werden kann, wohingegen härtere γ -Strahlung eine so starke Abschirmung benötigt, daß ein direkter Umgang mit dem Material nicht mehr praktikabel ist. Für μ_a und μ_m gibt Hubble [12] für 40 Elemente Werte bei verschiedenen Energien. Durch lineare Interpolation errechnet FISPACT die fehlenden Werte. Diese Näherung ist möglich, da die Absorptionskurven für $\mu_a(E)$ und $\mu_m(E)$ bei Energien größer 100 keV glatt sind, während sie bei niedrigeren Energien Diskontinuitäten aufweisen. Um den μ_m -Wert für ein zusammengesetztes Material zu erhalten, werden die μ_m -Werte der Elemente mit ihrem Massenanteil gewichtet und aufsummiert.

Neben der direkten γ -Strahlung aus dem Kern gibt es noch bei β^+ -Zerfällen die Annihilationsstrahlung. Außerdem ist es in manchen Fällen notwendig auch die Bremsstrahlung hochenergetischer β^- -Zerfälle zu berücksichtigen. Dazu wird folgende Näherungsformel benutzt [5], [13]:

$$N(n) = 2,76 \times 10^{-6} Z E_k \left(\frac{E_0}{E_k} \ln \left[\frac{e(n)}{e(n-1)} \right] - e(n) + e(n-1) \right)$$

$N(n)$ = Anzahl der γ -Quanten im n-ten Energieintervall
 Z = Kernladungszahl des Materials
 E_k = Energieintervallbreite (= 0,1 MeV)
 E_0 = mittlere Energie des β^- -Zerfalls
 $e(n)$ = obere Grenze des n-ten Energieintervalls in Einheiten von E_k , $e(0) = 1$

Um die biologische Wirkung des Materials bei Inkorporation oder Inhalation abzuschätzen wird die Aktivität jedes Nuklids mit einem spezifischen Faktor multipliziert. Der Faktor beschreibt die effektiv übertragene Dosis (S_V), die ein Erwachsener während 50 Jahren aufnimmt, wenn er soviel von dem Nuklid inkorporiert beziehungsweise inhaliert, wie einer Aktivität von einem Becquerel zum Zeitpunkt der Inkorporation entspricht.

2.2 Die Datenbibliotheken

Neben dem Computerprogramm FISPACT enthält das Paket EASY als weitere wesentliche Bestandteile mehrere Datenbibliotheken. Die beiden wichtigsten sind die Europäische Aktivierungsdatenbibliothek EAF [14] und die Zerfallsdatenbibliothek EAF2DECAY1.

Die EAF-Bibliothek entstand in Fortführung und Zusammenfassung bereits früher begonnener Arbeiten. Als Ausgangspunkt diente die letzte Version der Reihe der REAC-ECN-Bibliotheken von ECN Petten, REAC-ECN-5, zusammen mit der Bibliothek UKACT1 von AEA Industrial Technology Harwell. Ziel der Erstellung der EAF-Bibliothek ist es, einen möglichst vollständigen Satz von Neutronenwirkungsquerschnitten für Aktivierungsrechnungen mit dem Programm FISPACT bereitzustellen, d.h., es sollen alle vorkommenden neutroneninduzierten Reaktionen erfaßt werden. Darüberhinaus ist es eine ständige Aufgabe, die Qualität der Daten zu verbessern, dadurch daß neue Ergebnisse aus Expe-

perimenten und Evaluierungen ältere Daten ersetzen und ergänzen. Die Herkunft der Daten für die EAF-Bibliothek läßt sich in drei Gruppen gliedern:

- Übernahme voll evaluierter Daten aus anderen Bibliotheken wie zum Beispiel JEF-2, EFF-2, ENDF/B-6, JENDL-3.
- Ergebnisse aus Experimenten die noch nicht in Evaluationen einbezogen wurden.
- Daten, die mit Hilfe von Computerprogrammen errechnet wurden, da keine experimentellen Ergebnisse vorliegen.

Die Daten der ersten Gruppe sind die am besten gesicherten, da hier die Ergebnisse verschiedener Experimente zusammengetragen, bewertet und mit theoretischen Vorhersagen verglichen wurden. Auch die Daten der zweiten Gruppe besitzen einen hohen Vertrauenswert, da sie auf Meßdaten von Experimenten beruhen. Die größten Unsicherheiten beinhalten die Daten der dritten Gruppe, da sie entweder auf theoretischen Modellen oder auf empirischen Systematiken beruhen. Für die Berechnung der meisten Wirkungsquerschnitte dieser Gruppe wurde das semi-empirische Computerprogramm THRESH verwendet, und die Ergebnisse, wenn möglich, anhand von Systematiken renormiert. Für einen Teil der (n,γ) -Wirkungsquerschnitte wurden die Programme FISGIN und MASGAM verwendet. Beide Programme beruhen auf dem statistischen Kernmodell von Hauser und Feshbach und berücksichtigen die direkten und semidirekten Reaktionen durch einen Ansatz von Lane, Lynn und Brown. Die EAF-Bibliothek ist in zwei verschiedenen Datenstrukturen verfügbar: 100-Gruppen (GAM-II) und 175-Gruppen (VITAMIN-J) (s.a. Anhang A). Für die in Kapitel 4 dargestellten Ergebnisse wurde die Version 2 der EAF-Bibliothek in der 175-Gruppenstruktur benutzt, wie es auf dem Culham Meeting 1991 [15] vorgeschlagen wurde. Sie enthält Einträge für 11 857 Reaktionen an 669 verschiedenen Targetnukliden. Damit werden bis Polonium-210 alle Nuklide mit einer Halbwertszeit länger als einen halben Tag als Targetnuklide berücksichtigt.

Um aus dem mittels der Wirkungsquerschnitte berechneten Inventar die übrigen radiologischen Größen zu bestimmen, werden Daten über die Halbwertszeit, die Zerfallsarten, die mittleren α -, β - und γ -Energien und das γ -Spektrum für jedes durch Kernreaktion oder Zerfall entstandene Nuklid benötigt. Diese Angaben sind in der Zerfallsdatenbibliothek EAF2DECAY1 zusammengetragen. Sie enthält Einträge für 1377 Nuklide, darunter auch die 265 stabilen Nuklide, die der Vollständigkeit halber und wegen der besseren Verarbeitbarkeit eingefügt wurden. Die Daten stammen entweder aus anderen Datenbibliotheken (JEF-1, ENSDF, JEF-2) oder aus Standardhandbüchern.

Außer den beiden großen Datenbibliotheken gehören noch zwei kleinere Datensätze zum EASY-Paket. Die Datei EAF2DOSE enthält die Umwandlungsfaktoren für die Berechnung der Inkorporations- und Inhalationsdosen. Ein Teil der Daten wurde von internationalen Standards übernommen, wie sie zum Beispiel von der 'International Commission on Radiological Protection' (ICRP) entwickelt wurden. Die meisten Umwandlungsfaktoren wurden jedoch nach einer Methode von K. R. Smith [16] abgeschätzt. Der zweite Datensatz betrifft Daten die zur Berechnung von Transportgrenzen benötigt werden. Die Daten entsprechen den internationalen Regeln für den Transport radioaktiven Materials [17].

2.3 Das Neutronenspektrum

Um eine Aktivierungsrechnung mit FISPACT durchzuführen, benötigt das Programm die Angabe eines Neutronenspektrums. Wie im vorigen Abschnitt beschrieben werden die Wirkungsquerschnitte in der EAF-Bibliothek als Funktion der Energie in Gruppenform angegeben. Bevor die Daten jedoch von FISPACT benutzt werden können, müssen sie auf eine einzelne Zahl, den effektiven Wirkungsquerschnitt, reduziert werden. Der effektive Wirkungsquerschnitt σ_{eff} ist der über das Neutronenspektrum gemittelte Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma_{\text{eff}} = \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i \Phi_i}{\sum_{i=1}^n \Phi_i}$$

σ_{eff} = effektiver Wirkungsquerschnitt

σ_i = Wirkungsquerschnitt für die Energiegruppe i

Φ_i = Neutronenfluß für die Energiegruppe i (n/cm²/s)

n = Anzahl der Energiegruppen (100 für GAM-II, 175 für VITAMIN-J)

Um den Vergleich von Aktivierungsrechnungen zu erleichtern, wurde auf dem European Fusion File Meeting (NEA Data Bank, Dezember 1990) beschlossen, zusammen mit dem Paket EASY eine begrenzte Anzahl von Referenzneutronenspektren zu verteilen. Die Spektren wurden einer kurz zuvor im Auftrag der Kommission der Europäischen Gemeinschaft erstellten Studie über das ökonomische Potential und den Umwelteinfluß der Fusion [18] - [20] entnommen. Der Studie liegt die Annahme eines kommerziellen Fusionsreaktors vom Tokamak-Typ mit einer elektrischen Leistung von 1,2 GW zugrunde. Der Reaktor ist als EEF Referenzreaktor bekannt. Neutronenspektren für 23 verschiedene Zonen quer durch den Reaktor wurden erstellt. Da ein Schwerpunkt dieser Arbeit auf Strukturmaterialien für die erste Wand und das Blanket liegt, wurde für die Aktivierungsrechnungen das Spektrum der Zone 12 ausgewählt. Abbildung 2 zeigt dieses Spektrum. Es beschreibt den Neutronenfluß an der äußeren ersten Wand des Reaktors.

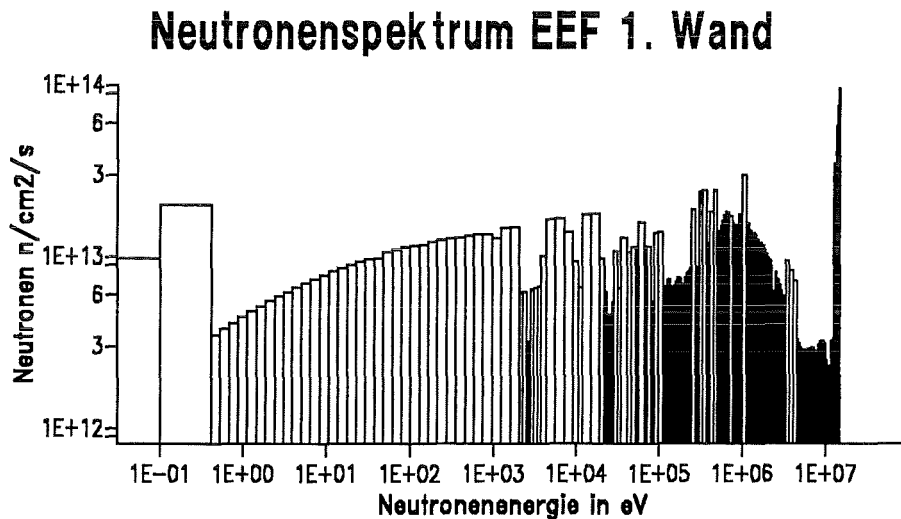


Abbildung 2. Neutronenspektrum der Zone 12 (erste Wand) des EEF Referenzreaktors.

Der Peak bei 14 MeV rührt von den Neutronen direkt aus der D-T-Fusionsreaktion her. Das Spektrum enthält jedoch auch einen erheblichen Anteil von Neutronen niedrigerer Energie. Sie stammen aus Streuprozessen innerhalb der Reaktionszone des Reaktors oder an der ersten Wand und führen zu der Schlußfolgerung, daß auch Neutroneneinfangreaktionen, die ihren maximalen Wirkungsquerschnitt bei thermischen oder epithermischen Energien haben, eine wichtige Rolle spielen.

3. Die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen

Ein Schwerpunkt dieser Arbeit ist die Untersuchung der Bedeutung sequentieller Reaktionen geladener Teilchen für die Aktivierung von Materialien. Der Begriff sequentielle Reaktionen bezeichnet einen zweistufigen Prozess, bei dem Teilchen, die in einem ersten Schritt produziert werden, in einem zweiten darauffolgenden Schritt weiterreagieren. Im Falle sequentieller Reaktionen geladener Teilchen werden durch Neutronenreaktionen im ersten Schritt geladene Teilchen x , in erster Linie Protonen (p), Deuteronen (d), Tritonen (t), Helium-3- (h oder ^3He) und α -Teilchen (α), produziert, die im zweiten Schritt selbst wieder Kernreaktionen auslösen. Im folgenden werden die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen nur durch die Angabe der Reaktion der geladenen Teilchen charakterisiert. Die Produktionsreaktionen für die geladenen Teilchen werden nicht angegeben. Die Frage, ob die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen einen spürbaren Effekt auf das Inventar haben, wurde bisher weitgehend verneint mit der Begründung, daß die entstehenden Flüsse geladener Teilchen wesentlich kleiner sind als der primäre Neutronenfluß. Dieses Argument ist jedoch nur solange gültig wie neutroneninduzierte primäre Reaktionen und sequentielle Reaktionen geladener Teilchen zum selben Endkern führen. So wird der Effekt einer sequentiellen (d,p)-Reaktion sicherlich vernachlässigbar klein sein gegenüber einer (n, γ)-Reaktion. Ist ein Endkern, der durch eine sequentielle Reaktion geladener Teilchen gebildet wird, ohne diese nur durch eine zwei- oder mehrstufige Kette neutroneninduzierter Reaktionen erreichbar, so verliert das obige Argument seine Gültigkeit, da nicht mehr allein die Teilchenflüsse maßgebend sind, sondern auch die Produktionsraten der Zwischenstufen in der Reaktionskette. So muß im Falle einer sequentiellen (p,n)-Reaktion die Produktion des Endkerns verglichen werden mit einer (n, γ)-Reaktion mit anschließendem β^- -Zerfall und einer (n,2n)-Reaktion. Dabei treten zwei Kerne als Zwischenstufe auf, deren Anzahl wesentlich geringer ist als die des Ursprungskerns. In einem solchen Fall sind Voraussagen über die Bedeutung der Reaktion nur schwer zu machen.

Z + 2			$(^3\text{He},n)$	(α,n)
Z + 1		(p,n) $(d,2n)$	(d,n) $(t,2n)$	(t,n)
Z	$(n,3n)$	$(n,2n)$	<u>Ursprungskern</u>	(n,γ)
Z-1	$(n,n't)$	(n,t) $(n,n'd)$	(n,d) $(n,n'p)$	(n,p)
Z-2	$(n,n'\alpha)$	(n,α) $(n,n'^3\text{He})$	$(n,^3\text{He})$ (n,pd)	$(n,2p)$
	N-2	N-1	N	N + 1

Tabelle 1. Kinematisch mögliche Kernreaktionen in einem Z-A-Feld: bei einer Neutronenenergie ≤ 15 MeV. Dabei ist Z die Kernladungszahl und N die Neutronenzahl des Ursprungskerns.

Tabelle 1 zeigt, daß die neutroneninduzierten Reaktionen nur zu Kernen mit gleicher oder kleinerer Kernladung Z führen. Erst durch nachfolgende β^- -Zerfälle können Kerne mit höherem Z erreicht werden. Die von geladenen Teilchen induzierten Reaktionen

führen direkt zu Kernen mit höherem Z. Um mit neutroneninduzierten Reaktionen den selben Endkern zu erreichen, braucht es deshalb mehrere Reaktionsschritte. Diese Überlegungen zusammen mit ersten Rechnungen [1] - [3] führten zu der Überzeugung, daß eine systematische Untersuchung des Phänomens notwendig ist. Dazu wurden das Computerprogramm PCROSS [21], [22] und drei neue Datenbibliotheken entwickelt [23], [24]. Sie werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

3.1 Das Computerprogramm PCROSS

Das Ziel der Entwicklung des Computerprogramms PCROSS war es, für jede kinematisch mögliche sequentielle (x,n)-Reaktion eine Zahl bereitzustellen, die die Reaktion beschreibt und von FISPACT genauso eingelesen und verarbeitet werden kann wie ein effektiver Wirkungsquerschnitt einer neutroneninduzierten Reaktion. Damit sollten Änderungen an FISPACT vermieden werden.

Diese Zahl soll die Bildung des Nuklids C durch die sequentielle Reaktion eines geladenen Teilchens $x = p, d, t, {}^3\text{He}, \alpha$ beschreiben. Dazu müssen zwei Reaktionsschritte berücksichtigt werden:

1. Die Produktion von geladenen Teilchen x durch Reaktionen $A(n,x)Y$ ($Y =$ irgendein weiteres Reaktionsprodukt)
2. Die sequentielle Reaktion des geladenen Teilchens an einem Kern B zum Endprodukt C: $B(x,n)C$

Dazu dient folgender Ansatz:

$$\frac{dN_C}{dt} = \sum_A \sum_i \sigma_i^{(n,x)} \Phi_i^n N_A \Delta E_i \sum_j f_{ij}^{(n,x)} \Delta E_j \sum_{k=j}^1 \sigma_k^{(x,C)} N_B \Delta R_k^x \quad (3.1)$$

$\frac{dN_C}{dt}$ = Veränderung der Anzahl der Kerne des Nuklids C durch die sequentielle (x,n) Reaktion.

$\sigma_i^{(n,x)}$ = energieabhängiger Wirkungsquerschnitt für die Produktionsreaktionen der geladenen Teilchen $A(n,x)Y$ (cm^2).

Φ_i^n = energieabhängiger Neutronenfluß ($n/\text{cm}^2/\text{s}/\text{MeV}$)

N_A = Anzahl der Kerne des Nuklids A (cm^{-3})

ΔE_i = Breite des Energieintervalls i im Neutronenspektrum (MeV)

$f_{ij}^{(n,x)}$ = normiertes Spektrum der geladenen Teilchen x abhängig von der Energie des einlaufenden Neutrons (MeV^{-1})

ΔE_j = Breite des Energieintervalls j im Spektrum des geladenen Teilchens (MeV)

$\sigma_k^{(x,C)}$ = energieabhängiger Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $B(x,n)C$ (cm^2)

N_B = Anzahl der Kerne des Nuklids B

ΔR_k^x = differentielle Reichweite des geladenen Teilchens x mit der Energie E_k bei Energieverlust in 1 MeV Schritten (cm)

Die Gleichung enthält vier Summationen. Die ersten drei davon beschreiben die Produktion der geladenen Teilchen, die letzte die (x,n)-Reaktion. Dabei werden mit der Summation über A alle möglichen Produktionskanäle erfaßt. Mit der Summation über i wird über die Energie der einlaufenden Neutronen summiert mit j über die Energie der auslaufenden geladenen Teilchen und mit der Summe über k wird die begrenzte Reichweite der geladenen Teilchen berücksichtigt. Um das Ziel einer für FISPACT verständlichen Zahl zu erreichen, muß der Ausdruck auf die Form

$$\frac{dN_C}{dt} = \sigma_{\text{Pseudo}}^{(x,C)} \Phi^n N_B$$

$\sigma_{\text{Pseudo}}^{(x,C)}$ = Pseudowirkungsquerschnitt (cm²)

Φ^n = integrierter Neutronenfluß (n/cm²/s)

gebracht werden. $\sigma_{\text{Pseudo}}^{(x,C)}$ wird als Pseudowirkungsquerschnitt bezeichnet, weil er nicht mehr auf die Zahl der geladenen Teilchen sondern auf die Zahl der primären Neutronen normiert ist. Die obige Form erreicht man, wenn man $\sigma_{\text{Pseudo}}^{(x,C)}$ folgendermaßen definiert:

$$\sigma_{\text{Pseudo}}^{(x,C)} = \frac{1}{\Phi^n} \sum_A \sum_{i=1}^{175} \sigma_i^{(n,x)} \Phi_i^n N_A \Delta E_i \sum_{j=1}^{24} f_{ij}^{(n,x)} \Delta E_j \sum_{k=j}^1 \sigma_k^{(x,C)} \Delta R_k^x$$

In dieser Gleichung wurden die verwendeten Datenstrukturen berücksichtigt: VITAMIN-J (175-Gruppenstruktur) für den Neutronenfluß und die Neutronenwirkungsquerschnitte; 24 Gruppen mit 1 MeV Intervallbreite für die übrigen energieabhängigen Größen.

Der so definierte Pseudowirkungsquerschnitt hat jetzt die gewünschte Form, ist jedoch über N_A noch zeitabhängig. FISPACT benötigt aber eine zeitunabhängige Größe. Die zeitliche Änderung von N_A ist abhängig von der Bestrahlungsdauer und der Reaktionsrate. In den meisten hier zu untersuchenden Fällen kann davon ausgegangen werden, daß die zeitlichen Änderungen von N_A und deren Auswirkungen auf den Pseudowirkungsquerschnitt gering sind. Deshalb kann N_A von der anfänglichen Zusammensetzung des Materials übernommen werden. Es bleibt jedoch anzumerken, daß dies nicht für alle Fälle gelten muß. Die obige Annahme erlaubt es zudem, durch Umordnung der Summationen den Rechenaufwand deutlich zu verringern.

$$\sigma_{\text{Pseudo}}^{(x,C)} = \frac{1}{\Phi^n} \sum_{k=1}^{24} \sigma_k^{(x,C)} \Delta R_k^x \sum_A \sum_{i=1}^{175} \sigma_i^{(n,x)} \Phi_i^n N_A \Delta E_i \sum_{j=k}^{24} f_{ij}^{(n,x)} \Delta E_j$$

Setzt man

$$\Phi_k^x = \Delta R_k^x \sum_A \sum_{i=1}^{175} \sigma_i^{(n,x)} \Phi_i^n N_A \Delta E_i \sum_{j=k}^{24} f_{ij}^{(n,x)} \Delta E_j$$

und

$$\sigma_{\text{Pseudo}}^{(x,C)} = \frac{1}{\Phi^n} \sum_{k=1}^{24} \sigma_k^{(x,C)} \Phi_k^x$$

so zerfällt die Gleichung in zwei Teile, die man interpretieren kann als die Erzeugung des geladenen Flusses Φ^x und die Renormierung des Wirkungsquerschnittes $\sigma^{(x,C)}$ zum Pseudowirkungsquerschnitt $\sigma_{\text{Pseudo}}^{(x,C)}$. Anders ausgedrückt: Der Neutronenfluß wird zuerst in einen Fluß geladener Teilchen umgewandelt, der dann mit dem umgebenden Material weiterreagiert. Der Rechenvorteil ergibt sich dadurch, daß der geladene Fluß nur noch einmal berechnet werden muß und damit alle Wirkungsquerschnitte in Pseudowirkungsquerschnitte umgewandelt werden können. Der geladene Fluß und der Pseudowirkungsquerschnitt sind nicht von N_b abhängig. Vielmehr wird für N_b von FISPACT der jeweils aktuell errechnete Wert eingesetzt. Somit können wie bei den neutroneninduzierten Reaktionen lange Reaktionsketten aus neutroneninduzierten Reaktionen und sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen berechnet werden.

3.2 Die benötigten Kerndaten

Aus dem vorhergehenden Abschnitt insbesondere Gl. 3.1 ergibt sich, daß vier Gruppen von Kerndaten benötigt werden.

1. Wirkungsquerschnitte für die Produktion der geladenen Teilchen x in (n,x)Y-Reaktionen, $\sigma^{(n,x)}$
2. normierte Spektren für die geladenen Teilchen x aus den (n,x)Y-Reaktionen, $f^{(n,x)}$
3. Wirkungsquerschnitte für die Produktion der Endkerne C durch die (x,n)-Reaktionen, $\sigma^{(x,C)}$
4. differentielle Reichweiten der geladenen Teilchen in Materie, ΔR^x

Mit Hilfe der VITAMIN-J (175-Gruppen) Datenstruktur wird für die Neutronen ein Energiebereich bis 20 MeV abgedeckt. Deshalb wurde für die Daten der geladenen Teilchen als obere Energiegrenze 24 MeV gewählt, um auch alle Reaktionen mit positiven Q-Werten vollständig zu erfassen. Wie in der Datenbibliothek EAF-2 wurden alle Kerne mit einer Halbwertszeit von mehr als einem halben Tag von Wasserstoff bis Polonium-210 als mögliche Targets berücksichtigt, insgesamt 685.

Bevor man daran geht neue Datenbibliotheken zu entwickeln, muß überprüft werden, welche Daten bereits vorhanden sind. Die Produktionswirkungsquerschnitte für die geladenen Teilchen können der EAF-Bibliothek entnommen werden. Die EAF-Bibliothek orientiert sich zwar an der Produktion der Endkerne und nicht an der Produktion geladener Teilchen, wie hier benötigt, aber durch aufsummieren aller relevanten Kanäle erhält man die gewünschten Wirkungsquerschnitte.

Weit weniger günstig zeigt sich die Situation, wenn es darum geht Daten über die Spektren geladener Teilchen zu finden. Es sind fast keine Informationen verfügbar. Eine Ausnahme bilden die experimentellen Daten über (n,p), (n, α) und teilweise (n,d) Spektren, die von Grimes et al. [25] gemessen wurden. Sie sind für eine begrenzte Anzahl von Kernen verfügbar, decken jedoch nicht den gesamten Energiebereich ab. Auf Grund dieser schlechten Situation wurde die Bibliothek KFKSPEC völlig neu erstellt.

Etwas mehr Informationen gibt es über Wirkungsquerschnitte geladener Teilchen für (x,n)-Reaktionen $\sigma^{(x,C)}$. Leider enthalten die Bibliotheken ECPL-86 [26] und GRAZ-87 [27] nur Angaben für leichte Kerne. Das selbe gilt für die Daten von Abramovich et al. [28]. Der Nutzen der Datenbibliothek des Kurchatov-Instituts Moskau [29] ist unter anderem deshalb begrenzt, da es sich vielfach um Ergebnisse handelt, die an dicken Targets gewonnen wurden (thick target yields). Für Protonen, Deuteronen und α -Teilchen wurden ab 1972 zuerst von Lange und Münzel [30] dann von Keller et al. [31] Systematiken entwickelt. Diese beruhten auf experimentellen Daten und Annahmen aus dem statistischen Kernmodell. Die letzte computerisierte Version ging jedoch verloren. Aber eine 1975 von Pearlstein erarbeitete Version [32] wurde 1985 von der Internationalen Atom Energie Agentur wieder aufgenommen. Sie enthält Daten für p-, d- und α -Reaktionen an stabilen Isotopen von Z = 21 bis 83. Auch eine Suche in der Datensammlung EXFOR [33] brachte nur wenig zusätzliche Informationen, da die meisten hier interessierenden Kerne und Reaktionen bisher nicht in Experimenten gemessen wurden. Deshalb wurde auch die Bibliothek KFKXN neu erstellt. Daten für Kerne leichter als Bor wurden von der Bibliothek GRAZ-87 übernommen.

Problemlos dagegen war die Zusammenstellung der Daten für die differentiellen Reichweiten. Hier stand das von Ziegler et al. entwickelte und von Möslang weiterentwickelte und ausgetestete Programm PRAL [34], [35] für Reichweitenberechnungen geladener Teilchen in Materie zur Verfügung. Damit konnte die Bibliothek KFKSTOPP mit einer für diesen Zweck geeigneten Datenstruktur neu erstellt werden.

3.3 Die Erstellung der neuen Datenbibliotheken

3.3.1 Kernmodelle und verwendetes Computerprogramm

In dem hier zu betrachtenden Energiebereich bis etwa 20 MeV ist der vorherrschende Reaktionsmechanismus der des Compound-Kerns. Zusätzlich müssen Beiträge von Prä-Compoundzuständen, die der Ausbildung des voll im Gleichgewicht befindlichen Compound-Kerns vorausgehen berücksichtigt werden. Derartige Compound / Prä-Compound-Modelle beruhen auf einer quantenmechanischen Basis, und lassen sich vergleichsweise klar formulieren [36]. Ihre Anwendbarkeit für Kerndatenauswertungen wurde weithin bestätigt. Außerdem sind sie ein Standardwerkzeug zur Vorhersage unbekannter Wirkungsquerschnitte. Nicht zuletzt deshalb werden ständig international Anstrengungen unternommen die physikalischen Grundlagen [37] zu verbessern und ausgetestete Parametersätze, wie sie für das optische Potential [38] und die Kernzustandsdichte [39] benötigt werden, bereitzustellen.

Da für die neuen Datenbibliotheken große Datenmengen zu erzeugen waren, wurde das schnell arbeitende Programm ALICE ausgewählt. Es wurde während mehr als zwei Jahrzehnten am Lawrence Livermore National Laboratory von Blann und Bisplinghoff, Blann und Vonach und Blann erstellt und weiterentwickelt [40] - [42]. Es basiert auf einem Prä-Compound-Hybridmodell [43], [44] und dem Compound-Modell von Weißkopf und Ewing [45]. Für die Rechnungen zu den Datenbibliotheken wurde eine Version vom Dezember 1990 benutzt. Das Programm kennt keine Beschränkung in Bezug auf die Art der einlaufenden Teilchen, anders als in den Ausgangskanälen, wo nur Neutronen, Protonen und Deuteronen sowie α - und γ -Teilchen auftreten können. Weiterhin bezieht ALICE eine große Anzahl von direkten Prozessen mit ein, wenn auch in vereinfachter Weise, mittels des Zerfalls ungebundener Teilchen-Loch-Zustände, wie sie ohnehin im Hybridmodell vorkommen. Nicht berücksichtigt werden dagegen niederenergetische kollektive Anregungen, wie sie bei der inelastischen Streuung vorkommen. Letzteres ist hier jedoch irrelevant, da nur relative Spektren geladener Teilchen aus (n,x)-Reaktionen und (x,n)-Anregungsfunktionen gerechnet werden. Bei den Rechnungen wurden nur Parameter verwendet die optional in ALICE vorgesehen sind. Insbesondere wurde ein allgemeiner Parametersatz für das optische Potential und die entsprechende parabolische Näherung zur Berechnung der inversen Wirkungsquerschnitte benutzt. Da ALICE nicht zwischen dem Grundzustand und angeregten Kernzuständen von Target- und Produktkernen unterscheidet, wurden angeregte Zustände als Reaktionsprodukte nicht gesondert berücksichtigt. Für langlebige, angeregte Zustände als Targets wurden die entsprechenden Daten des Grundzustandes eingesetzt.

3.3.2 Die Bibliothek KFKSPEC

Um den gesamten Energiebereich der Datenstruktur VITAMIN-J hinreichend abzudecken wurden 20 Energien für die einlaufenden Neutronen ausgewählt: $E_n = 18,5; 17,1; 16,1; 14,7; 14,0; 13,2; 12,4; 11,3; 10,2; 9,3; 8,4; 7,6; 6,9; 5,9; 5,1; 4,3; 3,3; 2,4; 1,5$ und 0,6 MeV. Die Beiträge der verschiedenen Reaktionskanäle wurden aufsummiert, sodaß totale Produktionsspektren für die geladenen Teilchen x entstanden. Die Spektren sind in 1 MeV Intervallen gegeben für mittlere Energien der geladenen Teilchen von $E_x = 0,5; 1,5; \dots 23,5$ MeV. Die Spektren sind auf 1 normiert und zusammen mit dem energieintegrierten absoluten Wirkungsquerschnitt in der Bibliothek KFKSPEC gespeichert. Mit ALICE wurden Rechnungen für 674 Targetisotope von Bor-10 bis Polonium-210 und Teilchen $x = p, d, \alpha$ ausgeführt.

Ein anderes Vorgehen war für die Spektren der (n,t)- und (n, ^3He)-Reaktionen notwendig, da weder das Compound- noch das Prä-Compound-Modell hinreichend befriedigende

Ergebnisse liefern. Der Grund dafür ist, daß man es hier mit einem anderen Reaktionsmechanismus zu tun hat. Der Compoundanteil für die beiden Reaktionen ist im allgemeinen sehr klein, während die Prä-Compound-Modelle alle vor dem ungelösten Problem stehen, den Clusterbildungsprozess zu beschreiben. Deshalb wurde auf eine einfache kinematische Abschätzung für die obere Grenze zurückgegriffen. Damit kann man zumindest feststellen, ob die betreffenden sequentiellen Reaktionen einen wesentlichen Beitrag liefern. In einem nächsten Schritt müßten diese Fälle dann genauer untersucht werden. Ebenfalls kinematische Abschätzungen wurden für die Targetisotope mit $Z \leq 4$ benutzt.

Damit enthält die Bibliothek KFKSPEC Version 2 Spektren für 685 Targetisotope für je 20 verschiedene Neutronenenergien und 5 verschiedene geladene Teilchen. Jedes Spektrum besteht aus 24 Datenpunkten.

Die erst vor kurzem erstellte Version 3 enthält weitere 60 Targetisotope von Radon-222 bis Curium-248 in Anpassung an die Bibliothek EAF Version 3.

Abbildung 3 zeigt ein Datenbeispiel. Gezeigt werden die Spektren der geladenen Teilchen x aus (n,xy) -Reaktionen für das Isotop ^{31}P bei einer Neutronenenergie von 18,5 MeV. Nach einer Überschrifts- und einer Kommentarzeile folgt eine Zeile, die die vollständige Identifikation der Reaktion ermöglicht. Die erste Zahl bezeichnet das Targetisotop ^{31}P , in der in der EAF-Bibliothek üblichen Weise $Z * 10\,000 + A * 10$, wobei Z die Kernladungszahl und A die Zahl der Kernteilchen angibt. Durch die zweite Zahl wird das auslaufende geladene Teilchen X gekennzeichnet. Dabei bedeuten die Zahlen 1030 bis 1070 die Teilchen p , d , t , ^3He und α in dieser Reihenfolge. Die folgenden beiden Zahlen beziehen sich auf die VITAMIN-J Datenstruktur. Zusammen mit der nächsten Zahl geben sie die Energie der einlaufenden Neutronen wider, die bei der Berechnung für dieses Spektrum benutzt wurde. Zuletzt wird der von ALICE errechnete Produktionswirkungsquerschnitt in Barn angegeben. Die folgenden drei Zeilen enthalten die 24 Datenpunkte des auf eins normierten Spektrums.

```

150310          ***** P 31(N,*X) *****          KFKSPEC-2
      ALICE OUTPUT: EN=18.5MEV; T AND H: KINEMATICAL LIMIT KFKSPEC-2
150310 1030  1  1  18.5  0.519E+00  0.519E+00          KFKSPEC-2
0.000000  0.000000  0.247517  0.230665  0.150233  0.101317  0.071108  0.052867
0.038669  0.028906  0.021371  0.016375  0.012980  0.010106  0.007828  0.005882
0.004178  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
150310 1040  1  1  18.5  0.159E-01  0.159E-01          KFKSPEC-2
0.000000  0.000000  0.103453  0.197607  0.196829  0.163003  0.120161  0.082408
0.055347  0.035686  0.022474  0.014251  0.008781  0.000000  0.000000  0.000000
0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
150310 1050  1  1  18.5  0.000E+00  0.000E+00          KFKSPEC-2
0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  1.000000
0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
150310 1060  1  1  18.5  0.000E+00  0.000E+00          KFKSPEC-2
0.000000  0.000000  0.000000  1.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
150310 1070  1  1  18.5  0.110E+00  0.110E+00          KFKSPEC-2
0.000000  0.000000  0.000000  0.013819  0.101855  0.173669  0.173734  0.143520
0.116000  0.093916  0.069000  0.046048  0.029707  0.019136  0.012020  0.007576
0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000

```

Abbildung 3. Datenbeispiel aus der Bibliothek KFKSPEC: Beschreibung siehe Text.

3.3.3 Die Bibliothek KFKXN

Wie im Fall der Bibliothek KFKSPEC wurden auch für die Bibliothek KFKXN Version 2 Rechnungen mit ALICE für 674 Targetisotope von Bor-10 bis Polonium-210 durchgeführt, um die benötigten (x,n) Wirkungsquerschnitte zu erhalten. Für die Kerne leichter als Bor-10 wurden Daten aus der Bibliothek GRAZ-87 übernommen. Es muß jedoch darauf hingewiesen werden, daß die (d,n) und (t,n) Wirkungsquerschnitte mit Vorsicht zu behandeln sind, da in diesen beiden Fällen Aufbruch- und Protoneneinfangreaktionen einen wesentlichen Beitrag liefern. Sie können im Hybridmodell nur näherungsweise beschrieben werden. Außerdem liefern Deuteronen und Tritonen hohe Anregungsenergien, da sie selbst nur schwach gebunden sind. Deshalb und auch wegen der hohen Q-Werte überschreiten die Wirkungsquerschnitte für die Aussendung zweier Neutronen oft diejenigen für die Aussendung eines Neutrons. Deswegen wurden auch die (d,2n)- und (t,2n)-Reaktionen in die Bibliothek aufgenommen. Insgesamt enthält die Bibliothek KFKXN Version 2 Einträge für je 7 Reaktionen an 685 Targetisotopen von Wasserstoff bis Polonium-210 und die Version 3 weitere 60 Targetisotope von Radon-222 bis Curium-248.

Abbildung 4 zeigt ein Datenbeispiel. Gezeigt werden die Wirkungsquerschnitte für die Reaktion $^{31}\text{P}(\text{p},\text{n})^{31}\text{S}$. Nach einer Überschrifts- und einer Kommentarzeile folgen die Wirkungsquerschnitte in Barn. Die Überschriftszeile enthält zugleich die Identifikation der Reaktion. Die erste Zahl bezeichnet das Targetisotop (150310) die zweite das Projektil (2 für Proton) und die dritte das auslaufende Teilchen (11 für Neutron).

150310 2 11	P 31(P,N)					KFKXN-2
	ALICE OUTPUT:					KFKXN-2
0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
0.0000E+00	0.1705E-01	0.3805E-01	0.5768E-01	0.7028E-01	0.8150E-01	0.8150E-01
0.9175E-01	0.9523E-01	0.9727E-01	0.8981E-01	0.7234E-01	0.6018E-01	0.6018E-01
0.5096E-01	0.4278E-01	0.3814E-01	0.3350E-01	0.3049E-01	0.2748E-01	0.2748E-01

Abbildung 4. Datenbeispiel aus der Bibliothek KFKXN: Beschreibung siehe Text.

3.3.4 Die Bibliothek KFKSTOPP

Die Bibliothek KFKSTOPP wurde mit Hilfe des Programms PRAL erstellt, das von Ziegler et al. entwickelt und von Möslang ausgebaut wurde. Mit ihm können die mittleren Reichweiten von Ionen in Materie berechnet werden. Um die differentiellen Reichweiten zu erhalten, wurden die mittleren Reichweiten für Anfangsenergien zwischen 1 MeV und 24 MeV in jeweils 1 MeV Schritten errechnet und paarweise voneinander abgezogen, so daß die in KFKSTOPP angegebenen Werte jeweils einem Energieverlust von 1 MeV bei der jeweiligen Anfangsenergie entsprechen. Die hier angewandte Methode hat den Vorteil, daß in kleinen Schritten interpoliert wird und nicht über die gesamte Reichweite. Die Bibliothek enthält Einträge für Teilchen $x = \text{p}, \text{d}, \text{t}, ^3\text{He}$ und α und für alle Elemente von Wasserstoff bis Curium ($Z = 1 - 96$). Für die Elemente Astat, Radon, Frankium, Actinium, Neptunium, Plutonium, Americium und Curium ($Z = 85, 86, 87, 89, 93, 94, 95, 96$) sind die angegebenen Werte Abschätzungen, da nur unvollständige Eingabedaten für das Programm PRAL zur Verfügung standen. Dies gilt besonders für die Elemente Astat ($Z = 85$) und Frankium ($Z = 87$) für die es in der Literatur keine Angaben über die Dichte gibt, die ein wichtiger Eingabeparameter für PRAL ist.

Abbildung 5 auf Seite 16 zeigt ein Datenbeispiel. Gezeigt werden die differentiellen Reichweiten für Protonen in Phosphor. Nach der Überschriftszeile mit der Identifikation des Materials werden die Reichweiten für 1 MeV Energieverlust in Zentimetern angegeben.

```

150310 10010 PROTON    0- 24 MeV ;    1MeV-steps
0.2117E-02 0.4165E-02 0.5857E-02 0.7410E-02 0.8876E-02 0.1028E-01
0.1164E-01 0.1296E-01 0.1424E-01 0.1550E-01 0.1674E-01 0.1796E-01
0.1915E-01 0.2033E-01 0.2150E-01 0.2265E-01 0.2379E-01 0.2492E-01
0.2603E-01 0.2714E-01 0.2824E-01 0.2933E-01 0.3041E-01 0.3180E-01

```

Abbildung 5. Datenbeispiel aus der Bibliothek KFKSTOPP: Beischreibung siehe Text.

3.4 Weiterentwicklung der drei KFK-Bibliotheken

Der Stand der drei Bibliotheken ist sehr unterschiedlich. Während für die Bibliothek KFKSTOPP keine Weiterentwicklung notwendig erscheint, befinden sich die Bibliotheken KFKSPEC und KFKXN eher in einem Anfangszustand. Dies wird auch durch Tabelle 2 und Abbildung 6 verdeutlicht.

q	Protonen	Deuteronen	Alpha's
q = 0	25	72	8
0 < q ≤ 0,001	0	82	7
0,001 < q ≤ 0,01	0	99	24
0,01 < q ≤ 0,1	0	144	51
0,1 < q ≤ 0,5	2	109	100
0,5 < q ≤ 1	8	46	99
1 < q ≤ 2	47	59	164
2 < q ≤ 10	168	45	180
10 < q ≤ 100	325	5	32
100 < q ≤ 1000	89	5	1
q > 1000	5	3	3

Tabelle 2. Statistischer Vergleich der Datenbibliotheken: KFKSPEC Version 3 und EAF Version 2 in der 175-Gruppenstruktur. Näheres siehe Text.

Vergleich KFKSPEC - EAF

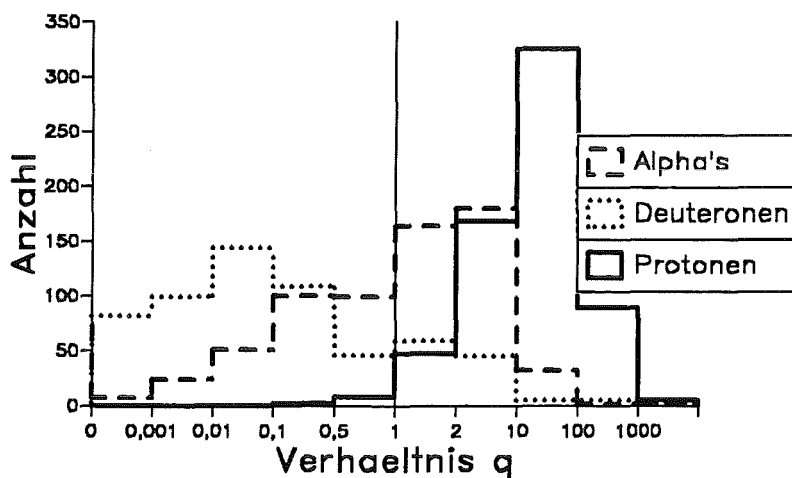


Abbildung 6. Statistischer Vergleich der Datenbibliotheken KFKSPEC und EAF

Der Inhalt der Tabelle ist ein statistischer Vergleich der beiden Datenbibliotheken KFKSPEC Version 3 und EAF Version 2 in der 175-Gruppenstruktur. Der Vergleich wurde für die Produktionswirkungsquerschnitte von Protonen, Deuteronen und α -Teilchen bei 14,7 MeV durchgeführt. Dazu wurde der von dem Computerprogramm ALICE errechnete und in der Bibliothek KFKSPEC mitabgespeicherte Produktionswirkungsquerschnitt durch die entsprechend aufsummierten Reaktionsquerschnitte der EAF-Bibliothek dividiert. Die Summation ist notwendig, da in der EAF-Bibliothek die Reaktionskanäle einzeln dargestellt sind, während der in KFKSPEC angegebene Wirkungsquerschnitt die Summation über die verschiedenen Reaktionen wie zum Beispiel (n,x) , $(n,n'x)$, $(n,2x)$, ... bereits beinhaltet.

$$q = \frac{\sigma_{\text{KFKSPEC}}(14,7\text{MeV})}{\sum \sigma_{\text{EAF}}(14,7\text{MeV})}$$

Das Verhältnis q wurde in folgenden Intervallen gezählt: $q = 0$; $0 < q \leq 0,001$; $0,001 < q \leq 0,01$; $0,01 < q \leq 0,1$; $0,1 < q \leq 0,5$; $0,5 < q \leq 1$; $1 < q \leq 2$; $2 < q \leq 10$; $10 < q \leq 100$; $100 < q \leq 1000$; $1000 < q$. Das Intervall $q = 0$ wurde eingefügt, weil an einigen Targetisotopen keine Produktion der betreffenden Teilchen bei 14,7 MeV stattfindet. Tabelle 2 auf Seite 16 zeigt, daß ALICE die Produktion von Protonen im Vergleich zu den Daten der EAF-Bibliothek überschätzt, während die Produktion von Deuteronen unterschätzt wird. Die Abweichungen bei α -Teilchen sind dagegen kleiner. Eine Wertung dieses Ergebnisses ist nicht ganz einfach. Einerseits wurde bei den Rechnungen mit ALICE für alle Targets der gleiche Parametersatz benutzt. Das betrifft vor allem die Wahl des Wechselwirkungspotentials und der Kernzustandsdichte. Ein solches Vorgehen verursacht immer ein gewisses Maß an Unsicherheit, da bestimmte Effekte wie zum Beispiel Schalenkorrekturen nicht berücksichtigt werden. Eine Annäherung an dieses Problem wird in der Dissertation von Daum [46] unternommen. Er vergleicht seine experimentellen Ergebnisse mit ALICE-Rechnungen mit verschiedenen Parametersätzen. Seine Ergebnisse lassen die Schlußfolgerung zu, daß eine individuellere Parameterwahl bessere Ergebnisse liefert. Andererseits beinhalten auch die Daten der EAF-Bibliothek Unsicherheiten, da der größte Teil von ihnen mit dem semi-empirischen Computerprogramm THRESH erstellt wurde. Nur ein kleiner Teil der Daten wurde durch experimentelle Ergebnisse gewonnen. Da aber in der EAF-Bibliothek die Arbeit und die Erfahrung vieler Jahre stecken, muß davon ausgegangen werden, daß die Fehler in deren Daten wesentlich kleiner sind. Deshalb wurde bei der Berechnung der Pseudowirkungsquerschnitte auf die Daten der EAF-Bibliothek zurückgegriffen. Sie werden zu Produktionswirkungsquerschnitten für die geladenen Teilchen aufsummiert und mit den normierten Spektren der Bibliothek KFKSPEC multipliziert (vgl. Gleichung 3.1). Dieses Vorgehen ist erlaubt, da die Form der Spektren der geladenen Teilchen nicht direkt mit der absoluten Größe der Wirkungsquerschnitte zusammenhängt. Die Mängel, die hier für die Bibliothek KFKSPEC sichtbar werden, gelten leider auch für die Bibliothek KFKXN mit dem zusätzlichen Nachteil, daß es hier keine Möglichkeit eines Vergleiches gibt. Es bestehen mehrere Möglichkeiten, die beiden KfK-Bibliotheken zu verbessern und weiterzuentwickeln:

1. verbesserte Rechnungen mit dem Programm ALICE, insbesondere durch individuelle Wahl der Parameter für wichtige Reaktionen.
2. realistischere Behandlung von Deuteronen, Tritonen und Helium-3 (Aufbruch und Protoneneinfang).
3. Bestätigung der Bibliothekseinträge durch Vergleich mit experimentellen oder evaluierten Daten.
4. Einbeziehen einzelner wichtiger Reaktionen, die nicht vom Typ (x,n) sind (z.B.: ${}^7\text{Li}(t, \gamma){}^{10}\text{B}$).
5. Untersuchung der sequentiellen (γ,n) -Reaktionen.

Diese Entwicklungen können jedoch nicht mehr im Institut für Materialforschung durchgeführt werden.

4. Durchführung und Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen

Nachdem in den Kapiteln 2 und 3 die Programme und Datenbibliotheken beschrieben wurden, die für die Aktivierungsrechnungen benutzt wurden, sollen nun die Durchführung der Rechnungen, die Wahl der Parameter und die Ergebnisse behandelt werden. Mit den Aktivierungsrechnungen wurden zwei Ziele verfolgt. Als erstes wurde systematisch für alle stabilen Elemente des Periodensystems der Einfluß der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen auf die Aktivierungseigenschaften untersucht. Darüberhinaus wurden Rechnungen für verschiedene mögliche Strukturmaterialien durchgeführt. Zusammen mit den Ergebnissen aus den Aktivierungsrechnungen für die Elemente wurden sie dazu benutzt Werkstoffe unter radiologischen Gesichtspunkten zu bewerten und zu verbessern. Dabei ging es nicht nur um die Wahl der Basis- und Legierungselemente, sondern auch um die Frage, welche Konzentrationen an Verunreinigungen noch vertretbar sind.

Um den Einfluß der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen auf die Aktivierungseigenschaften der Elemente zu untersuchen, wurden für jedes Element zwei Rechendurchläufe durchgeführt, einmal mit und einmal ohne sequentielle Reaktionen geladener Teilchen. Das Schema in Abbildung 7 auf Seite 19 verdeutlicht den Ablauf. In der linken Spalte sind die Datenbibliotheken angegeben, die für den jeweiligen Rechenschritt benutzt wurden, in der rechten Spalte die wichtigsten Parameter. Die mittlere Spalte enthält das jeweils benötigte Programm und das damit erzielte Ergebnis. Die unterlegten Teile sind die KfK-Ergänzungen. Da die Neutronenspektren und -wirkungsquerschnitte entweder in der

VITAMIN-J oder GAM-II Datenstruktur vorliegen, FISPACT jedoch nur effektive Wirkungsquerschnitte verarbeiten kann, werden in einem ersten Schritt für jede Reaktion die Neutronenwirkungsquerschnitte mit dem Neutronenspektrum zu einem effektiven Wirkungsquerschnitt gemittelt. Im zweiten Schritt, der benötigt wird, wenn die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen berücksichtigt werden sollen, werden die Pseudowirkungsquerschnitte mit Hilfe des Programms PCROSS errechnet und zwischen die effektiven Neutronenwirkungsquerschnitte eingefügt. Der dritte Schritt ist die eigentliche Aktivierungsrechnung mit FISPACT. Für alle in diesem Kapitel vorgestellten Rechenergebnisse wurden folgende Datenbibliotheken als Eingabe benutzt:

- für die Neutronenwirkungsquerschnitte die Bibliothek EAF Version 2 in der VITAMIN-J (175-Gruppen) Datenstruktur (vgl. Kap. 2.2),
- für das Neutronenspektrum das Spektrum der äußeren ersten Wand des EEF Tokamakreaktors genannt Zone 12 (vgl. Kap. 2.3),
- für die Spektren der geladenen Teilchen aus den neutroneninduzierten Reaktionen die Bibliothek KFKSPEC Version 3 (vgl. Kap. 3.3.2),
- für die differentiellen Reichweiten der geladenen Teilchen die Bibliothek KFKSTOPP (vgl. Kap.3.3.4),
- für die Wirkungsquerschnitte der geladenen Teilchen die Bibliothek KFKXN Version 3 (vgl. Kap. 3.3.3),
- für die Zerfallsdaten die Bibliothek EAF2DECAY1 (vgl. Kap. 2.2)
- und für die Dosimetriedaten die Bibliothek EAF2DOSE (vgl. Kap. 2.2).

Die wichtigsten Parameter sind die Materialzusammensetzung, die Bestrahlungsdauer und -intensität, sowie die Abklingzeiten. Um die Ergebnisse der verschiedenen Gruppen besser vergleichen zu können, wurden auf dem Culham Meeting April 1991 [15] Werte für die Bestrahlungsdauer und -intensität vorgeschlagen. Bei der Bestrahlungsdauer ging man davon aus, daß die erste Wand eines Reaktors mindestens 2,5 Jahre der Neutro-

nenstrahlung standhalten muß, damit der Reaktor wirtschaftlich arbeiten kann. Als Neutronenbelastung wurden 5 MW/m^2 vorgeschlagen, was einem Neutronenfluß von $2,17 \cdot 10^{15} \text{ n/cm}^2/\text{s}$ entspricht.

Für die Beurteilung von Materialien insbesondere unter den Gesichtspunkten Sicherheit und Umwelteinfluß ist nicht nur das Verhalten während der Bestrahlung von Bedeutung, sondern auch danach. Dabei spielen verschiedene Zeiträume eine wichtige Rolle. Bei einem Störfall oder vor Wartungsarbeiten ist es wichtig zu wissen, wie hoch die Strahlenbelastung unmittelbar nach Abschalten des Reaktors ist und wie schnell sie sich abbaut. Für die Wiedergewinnung von Material ist das Abklingverhalten während einiger Jahre oder Jahrzehnte wichtig, da das Material erst einige Zeit zwischengelagert werden

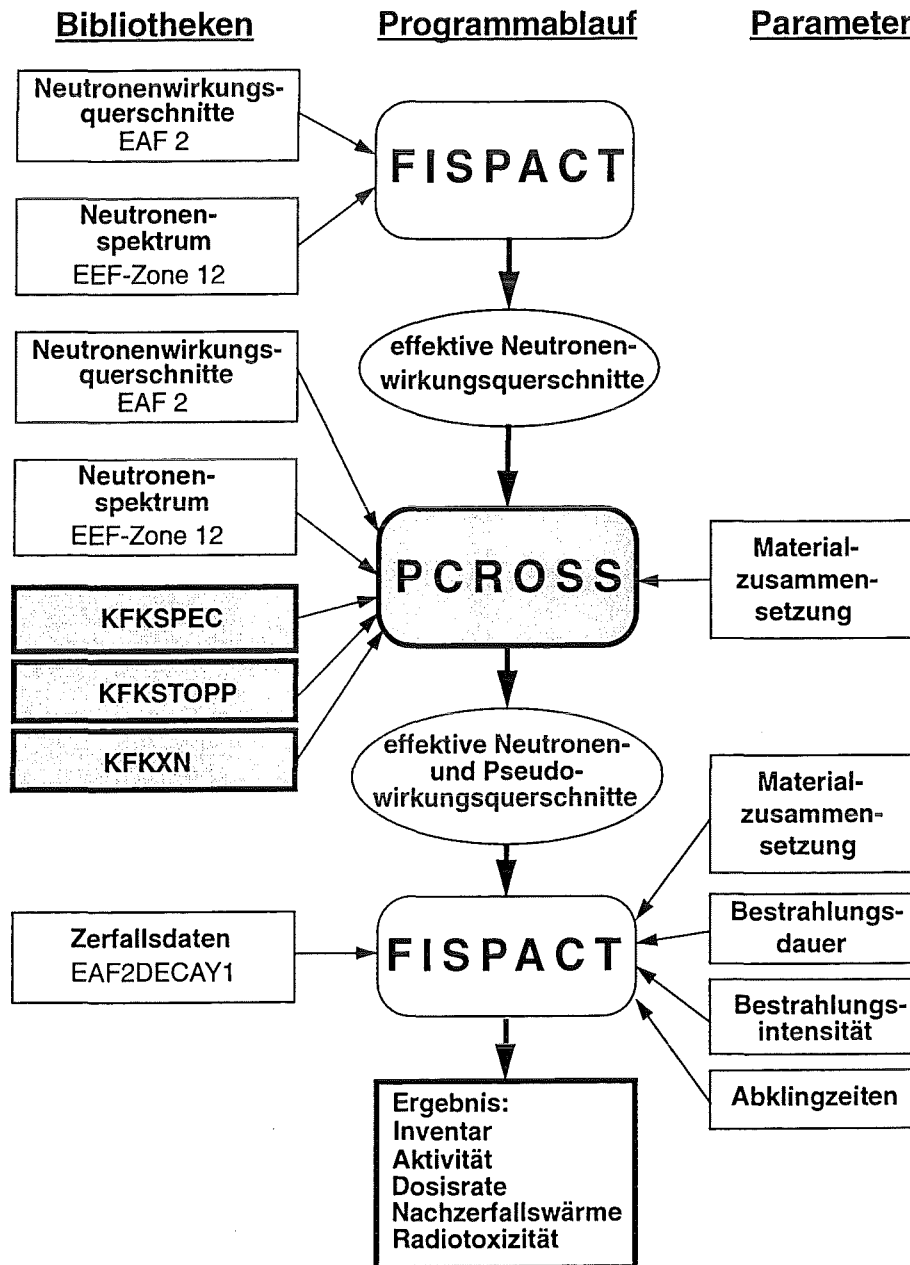


Abbildung 7. Ablaufschema der Aktivierungsrechnungen: In der linken Spalte sind die Datenbibliotheken angegeben, die für den jeweiligen Rechenschritt benutzt wurden, in der rechten Spalte die wichtigsten Parameter. Die mittlere Spalte enthält das jeweils benötigte Programm und das damit erzielte Ergebnis. Die unterlegten Teile sind die KfK-Ergänzungen.

kann, bis die Radioaktivität genügend weit abgeklungen ist und es wiederverwertet wird. Für die endgültige Lagerung von Abfällen ist das Abklingverhalten während sehr langer Zeiträume von Bedeutung. Deshalb wurden das Inventar und die daraus abgeleiteten Größen Aktivität, γ -Dosisrate, Nachwärme, Inkorporations- und Inhalationsdosis für 24 verschiedene Zeitpunkte berechnet, vom Ende der Bestrahlung bis eine Million Jahre danach. Tabelle 3. enthält die gewählten Zeitpunkte.

Jahre	Jahre	Jahre	Jahre	Jahre
0	0.1	5	200	30 000
0.001	0.2	10	500	100 000
0.003	0.5	20	1 000	300 000
0.01	1	50	3 000	1 000 000
0.03	2	100	10 000	

Tabelle 3. Abklingzeiten: Für die angegebenen Zeiten nach Ende der Bestrahlung wurden das Inventar und die abgeleiteten radiologischen Größen berechnet.

Bei der Untersuchung der Elemente wurde als Materialzusammensetzung 1 kg intrinsisch reinen Materials angenommen, während für die Legierungen sowohl Rechnungen mit als auch ohne Verunreinigungen durchgeführt wurden. Die Zusammensetzung der Legierungen wird zusammen mit den Ergebnissen dargestellt.

4.1 Der Effekt der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen

Um die Auswirkungen der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen möglichst übersichtlich darzustellen, wurden sie in Tabellen zusammengefaßt. Dabei wurde für jede der folgenden radiologischen Größen eine eigene Tabelle erstellt: Aktivität, Nachzerfallswärme, γ -Dosisrate, Inkorporations- und Inhalationsdosis. Die Tabellen sind alle nach dem gleichen Schema aufgebaut. Im Kopf ist angegeben, welche Größe behandelt wird. In den ersten beiden Spalten sind die chemischen Zeichen der Elemente und ihre Kernladungs- oder Ordnungszahl Z eingetragen. Die Tabellen enthalten nur diejenigen Elemente, bei denen für die betrachtete Größe eine Zunahme von wenigstens 10 % des Gesamtwertes zu verzeichnen war. Die dritte Spalte enthält Angaben zum Zeitraum des Auftretens des Effektes. Angegeben sind der erste und der letzte Zeitpunkt des Auftretens der Zunahme im Gesamtwert in Jahren nach Ende der Bestrahlung. Der maximale Zuwachsfaktor in Spalte vier ist der Quotient aus der jeweiligen Größe mit den sequentiellen Reaktionen durch die Größe ohne die sequentiellen Reaktionen. Es handelt sich also nur um eine relative Angabe, die sich auf die Gesamtgröße und nicht auf das verursachende Radioisotop bezieht. Das Radioisotop ist in Spalte fünf eingetragen. Sind zwei Isotope durch einen Schrägstrich getrennt, so handelt es sich um eine Zerfallskette, bei der das zuerst angegebene Isotop den Zeitraum des Auftretens des Effektes bestimmt, weil es langlebiger ist, während das zweite Isotop der eigentliche Verursacher des Effektes ist. In der letzten Spalte 'Entstehung' schließlich wurden die wichtigsten Produktionsprozesse für das Radioisotop zusammengestellt, sofern sie eine sequentielle Reaktion enthalten. Nicht angegeben werden die Produktionsreaktionen für die geladenen Teilchen. Die Prozentzahlen geben an wie stark der jeweilige Prozess an der Bildung des betreffenden Radioisotops beteiligt ist. Der Eintrag 'lange Reaktionsketten' in dieser Spalte bedeutet, daß das Radioisotop über sehr viele und lange Wege produziert werden kann, von denen jedoch keiner besonders dominant ist. Deshalb wurde auf die explizite Angabe verzichtet. Ein Beispiel soll die gegebenen Erklärungen verdeutlichen.

In der Tabelle für die γ -Dosisrate finden sich folgende Einträge:

γ -Dosisrate					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Pt	78	$10^4 - 3 \cdot 10^5$	$4,4 \cdot 10^4$	$^{202}\text{Pb}/^{202}\text{Tl}$	$^{198}\text{Pt}(n, \gamma)^{199\text{m}}\text{Pt}(\text{IT})^{199}\text{Pt}(\beta^-)^{199}\text{Au}(\beta^-)$ $^{199}\text{Hg}(\alpha, n)^{202}\text{Pb}$ 70,3 % $^{198}\text{Pt}(n, \gamma)^{199}\text{Pt}(\beta^-)^{199}\text{Au}(\beta^-)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)$ ^{202}Pb 8,0 % $^{196}\text{Pt}(n, \gamma)^{197}\text{Pt}(\beta^-)^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}(n, \gamma)$ $^{199}\text{Au}(\beta^-)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)^{202}\text{Pb}$ 5,9 %

Tabelle 4. Beispiel zu den Ergebnistabellen

Dabei ist Pt das chemische Zeichen für Platin, das die Ordnungszahl 78 besitzt. Zwischen 10 000 Jahren und 300 000 Jahren nach Ende der Bestrahlung tritt durch die Berücksichtigung der sequentiellen Reaktionen eine Zunahme der Gesamtdosisrate des bestrahlten Platins auf. Sie vergrößert sich maximal auf das 44 000-fache der Gesamtdosisrate ohne Berücksichtigung der sequentiellen Reaktionen. Verursacht wird der Effekt durch eine höhere Produktion von ^{202}Pb , das eine Halbwertszeit von 52 602 Jahren hat. Es zerfällt allein über Elektroneneinfang ohne Aussendung von γ -Quanten in ^{202}Tl , das seinerseits über Elektroneneinfang mit einer Halbwertszeit von 12,23 Tagen in stabiles ^{202}Hg zerfällt. Dabei werden γ -Quanten freigesetzt, die die Zunahme der γ -Dosisrate bewirken. Die Zunahme der Produktion von ^{202}Pb ist wesentlich größer als die Zunahme der Gesamtdosisrate. Sie wächst von $1,43 \cdot 10^8$ ^{202}Pb Kernen um rund das 145 000-fache auf $2,07 \cdot 10^{13}$ ^{202}Pb Kernen. In der letzten Spalte sind die wichtigsten Produktionspfade angegeben. Zwischen den Isotopen ist die Art des Übergangs bezeichnet, entweder eine Kernreaktion oder ein radioaktiver Zerfall. Dabei steht β^- für einen β^- -Zerfall, β^+ für einen Elektroneneinfang und/oder β^+ -Zerfall und IT für einen isomeren Übergang.

4.1.1 Aktivität

Die Aktivität ist die am wenigsten empfindliche Größe. Außerdem ist sie allein wenig aussagekräftig, da der Zerfall eines radioaktiven Kerns noch keine Aussage über die Wirkung des Zerfalls auf die Umgebung zuläßt. So hat der Zerfall von ^{53}Mn nur wenig Auswirkungen, da das Isotop ^{53}Mn über einen Elektroneneinfang zerfällt, sodaß keine γ -Quanten ausgestrahlt werden. Nur eine schwache Röntgenstrahlung von maximal 6 keV wird freigesetzt. Ganz anders der Zerfall von ^{26}Al . Es zerfällt unter Aussendung eines Positrons (β^+ -Zerfall), das dann zusammen mit einem Elektron zu zwei γ -Quanten von je 511 keV zerstrahlt. Darüberhinaus ist der Zerfall mit weiterer hochenergetischer γ -Strahlung verbunden. Die Aktivität gibt deshalb nur einen ersten Hinweis auf Veränderungen.

Bei der Aktivität zeigen 15 Elemente eine Zunahme von mehr als 10 %. Bei den sieben Elementen Li, Na, Mg, V, Cr, Y und Au macht der Zuwachs mehr als eine Größenordnung aus. Er ist am größten bei Vanadin (190 000-fache Aktivität), Natrium (67 000-fache Aktivität) und Gold (32 000-fache Aktivität).

Aktivität					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Li	3	1 000 - 10 ⁶	nur (x,n)	¹⁰ Be	⁷ Li(α,n) ¹⁰ B(n,p) ¹⁰ Be 99,6 %
B	5	500 - 3 000	1,2	¹⁴ C	¹¹ B(α,n) ¹⁴ N(n,p) ¹⁴ C 99,9 %
Na	11	10 ⁴ - 10 ⁶	6,7 * 10 ⁴	²⁶ Al	²³ Na(α,n) ²⁶ Al 99,9 %
Mg	12	10 ⁴ - 10 ⁶	29	²⁶ Al	²⁶ Mg(p,n) ²⁶ Al 95,9 %
V	23	500 - 10 ⁶	1,9 * 10 ⁵	⁵³ Mn	⁵⁰ V(α,n) ⁵³ Mn 1,0 % ⁵¹ V(n,2n) ⁵⁰ V(α,n) ⁵³ Mn 31,2 % ⁵¹ V(n, γ) ⁵² V(β ⁻) ⁵² Cr(d,n) ⁵³ Mn 23,4 % ⁵¹ V(α,n) ⁵⁴ Mn(n,2n) ⁵³ Mn 34,1 %
Cr	24	500 - 10 ⁶	89	⁵³ Mn	⁵³ Cr(p,n) ⁵³ Mn 88,5 % ⁵² Cr(n, γ) ⁵³ Cr(p,n) ⁵³ Mn 1,3 % ⁵² Cr(d,n) ⁵³ Mn 7,2 %
Y	39	500 - 3 000	970	⁹¹ Nb	⁸⁹ Y(n,2n) ⁸⁸ Y(α,n) ⁹¹ Nb 8,7 % ⁸⁹ Y(n, γ) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(d,n) ⁹¹ Nb 5,8 % ⁸⁹ Y(n, γ) ^{90m} Y(IT) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(d,n) ⁹¹ Nb 1,6 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,2n) ⁹¹ Nb 49,3 %
					10 ⁴
		3*10 ⁴	4,3	⁹⁴ Nb	⁸⁹ Y(n, γ) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(α,n) ⁹³ Mo 76,8 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n, γ) ⁹³ Nb(n, γ) ⁹⁴ Nb 23,3 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n, γ) ⁹³ Nb(n, γ) ^{94m} Nb(IT) ⁹⁴ Nb 51,9 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n, γ) ^{93m} Nb(n, γ) ⁹⁴ Nb 7,1 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n, γ) ^{93m} Nb(n, γ) ^{94m} Nb(IT) ⁹⁴ Nb 15,8 %
		10 ⁵ - 10 ⁶	5,0	⁹² Nb	⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb 98,5 %
Sm	62	3 000	1,2	^{166m} Ho	lange Reaktionsketten
Eu	63	3 000	1,1	^{166m} Ho	lange Reaktionsketten
Tb	65	3*10 ⁵ - 10 ⁶	1,1	¹⁷⁶ Lu	lange Reaktionsketten
Ho	67	3*10 ⁵ - 10 ⁶	1,1	¹⁷⁶ Lu	lange Reaktionsketten
Re	75	5 - 50	1,1	¹⁹³ Pt	lange Reaktionsketten
Pt	78	10 ⁴ - 10 ⁵	3,2	²⁰² Pb/ ²⁰² Tl	¹⁹⁸ Pt(n, γ) ^{199m} Pt(IT) ¹⁹⁹ Pt(β ⁻) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 70,3 % ¹⁹⁸ Pt(n, γ) ¹⁹⁹ Pt(β ⁻) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 8,0 % ¹⁹⁶ Pt(n, γ) ¹⁹⁷ Pt(β ⁻) ¹⁹⁷ Au(n, γ) ¹⁹⁸ Au(n, γ) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 5,9 %

Aktivität					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Au	79	$10^4 - 3 \cdot 10^5$	$3,2 \cdot 10^4$	$^{202}\text{Pb}/^{202}\text{Tl}$	$^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}(n, \gamma)^{199}\text{Au}(\beta^-)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)$ ^{202}Pb 54,8 % $^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}(\beta^-)^{198}\text{Hg}(n, \gamma)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)$ ^{202}Pb 29,9 % $^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}(\beta^-)^{198}\text{Hg}(n, \gamma)^{199\text{m}}\text{Hg}(\text{IT})$ $^{199}\text{Hg}(n, \gamma)^{202}\text{Pb}$ 10,2 %
Hg	80	10^4	1,1	$^{202}\text{Pb}/^{202}\text{Tl}$	$^{198}\text{Hg}(n, \gamma)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)^{202}\text{Pb}$ 2,2 % $^{199}\text{Hg}(\alpha, n)^{202}\text{Pb}$ 18,6 %

Tabelle 5. Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die Aktivität

4.1.2 Nachzerfallswärme

Die bei einem radioaktiven Zerfall freigesetzte Energie, ob in Form von Teilchen- oder elektromagnetischer Strahlung oder als Rückstoßenergie des Kerns, wird letztlich in Wärme umgewandelt. Diese Nachzerfallswärme kann, wenn sie nicht abgeführt wird, Schäden am Material verursachen. Deshalb muß bei radioaktivem Material auf ausreichende Kühlung geachtet werden. So muß die erste Wand eines Fusionsreaktors auch nach Beendigung des Fusionsprozesses weitergekühlt werden und bei der Lagerung von radioaktivem Material darf nicht zuviel und nicht zu dicht gepackt werden. Die größten Energiemengen entstehen bei α -Zerfällen. Erschwerend kommt hinzu, daß die Energie wegen der geringen Reichweite der α -Teilchen in einem sehr kleinen Volumen abgegeben wird. α -Zerfälle spielen jedoch nur bei der Aktivierung sehr weniger Elemente eine Rolle (v.a. Seltene Erden). Wichtigste Quelle für die Nachzerfallswärme der meisten Elemente sind die β -Zerfälle, während die γ -Strahlung meist einen kleineren Beitrag liefert.

Die Tabelle enthält Einträge für 16 Elemente, von denen die sieben Elemente Li, Na, Mg, V, Cr, Y und Au Zuwächse von mehr als einer Größenordnung zeigen. Der Effekt ist am größten für die Elemente Natrium (820 000-fache Nachwärme), Gold (600 000-fache Nachwärme) und Vanadin (25 000-fache Nachwärme).

Nachzerfallswärme					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Li	3	$1\ 000 - 10^6$	nur (x,n)	^{10}Be	$^7\text{Li}(\alpha, n)^{10}\text{B}(n, p)^{10}\text{Be}$ 99,6 %
F	9	0,003 - 0,2	1,1	^{22}Na	$^{19}\text{F}(\alpha, n)^{22}\text{Na}$ 99,9 %
Ne	10	0,001 - 10	2,3	^{22}Na	$^{20}\text{Ne}(n, d)^{19}\text{F}(\alpha, n)^{22}\text{Na}$ 1,3 % $^{22}\text{Ne}(p, n)^{22}\text{Na}$ 89,3 %
Na	11	$200 - 10^6$	$8,2 \cdot 10^5$	^{26}Al	$^{23}\text{Na}(\alpha, n)^{26}\text{Al}$ 99,9 %
Mg	12	$200 - 10^6$	29	^{26}Al	$^{26}\text{Mg}(p, n)^{26}\text{Al}$ 95,9 %

Nachzerfallswärme						
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung	
V	23	1 000 - 10 ⁶	2,5 * 10 ⁴	⁵³ Mn	⁵⁰ V(α,n) ⁵³ Mn 1,0 % ⁵¹ V(n,2n) ⁵⁰ V(α,n) ⁵³ Mn 31,2 % ⁵¹ V(n, γ) ⁵² V(β ⁻) ⁵² Cr(d,n) ⁵³ Mn 23,4 % ⁵¹ V(α,n) ⁵⁴ Mn(n,2n) ⁵³ Mn 34,1 %	
Cr	24	500 - 10 ⁶	89	⁵³ Mn	⁵³ Cr(p,n) ⁵³ Mn 88,5 % ⁵² Cr(n, γ) ⁵³ Cr(p,n) ⁵³ Mn 1,3 % ⁵² Cr(d,n) ⁵³ Mn 7,2 %	
Y	39	500 - 1 000	1000	⁹¹ Nb ⁹⁴ Nb	⁸⁹ Y(n,2n) ⁸⁸ Y(α,n) ⁹¹ Nb 8,7 % ⁸⁹ Y(n, γ) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(d,n) ⁹¹ Nb 5,8 % ⁸⁹ Y(n, γ) ^{90m} Y(IT) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(d,n) ⁹¹ Nb 1,6 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,2n) ⁹¹ Nb 49,3 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,2n) ^{91m} Nb(IT) ⁹¹ Nb 33,0 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n, γ) ⁹³ Nb(n, γ) ⁹⁴ Nb 23,3 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n, γ) ⁹³ Nb(n, γ) ^{94m} Nb(IT) ⁹⁴ Nb 51,9 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n, γ) ^{93m} Nb(n, γ) ⁹⁴ Nb 7,1 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n, γ) ^{93m} Nb(n, γ) ^{94m} Nb(IT) ⁹⁴ Nb 15,8 %	
		3 000 - 10 ⁵	470		⁹² Nb	⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb 98,5 %
		10 ⁵ - 10 ⁶	160			
Nd	60	3 000	1,1	^{166m} Ho	lange Reaktionsketten	
Sm	62	3 000	1,2	^{166m} Ho	lange Reaktionsketten	
Eu	63	3 000	1,1	^{166m} Ho	lange Reaktionsketten	
Ho	67	3*10 ⁵ - 10 ⁶	1,1	¹⁷⁸ Lu	lange Reaktionsketten	
Pt	78	10 ⁴ - 3*10 ⁴	1,2	²⁰² Pb/ ²⁰² Tl	¹⁹⁸ Pt(n, γ) ^{199m} Pt(IT) ¹⁹⁹ Pt(β ⁻) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 70,3 % ¹⁹⁸ Pt(n, γ) ¹⁹⁹ Pt(β ⁻) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 8,0 % ¹⁹⁶ Pt(n, γ) ¹⁹⁷ Pt(β ⁻) ¹⁹⁷ Au(n, γ) ¹⁹⁸ Au(n, γ) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 5,9 %	
Au	79	10 ⁴ - 3*10 ⁵	6,0 * 10 ⁵	²⁰² Pb/ ²⁰² Tl	¹⁹⁷ Au(n, γ) ¹⁹⁸ Au(n, γ) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 54,8 % ¹⁹⁷ Au(n, γ) ¹⁹⁸ Au(β ⁻) ¹⁹⁸ Hg(n, γ) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 29,9 % ¹⁹⁷ Au(n, γ) ¹⁹⁸ Au(β ⁻) ¹⁹⁸ Hg(n, γ) ^{199m} Hg(IT) ¹⁹⁹ Hg(n, γ) ²⁰² Pb 10,2 %	
Hg	80	10 ⁴ - 10 ⁵	1,3	²⁰² Pb/ ²⁰² Tl	¹⁹⁸ Hg(n, γ) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 2,2 % ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 18,6 %	

Nachzerfallswärme					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Tl	81	100 - 200	1,5	²⁰⁷ Bi	²⁰³ Tl(n, γ) ²⁰⁴ Tl(α,n) ²⁰⁷ Bi 40,5 % ²⁰³ Tl(n, γ) ²⁰⁴ Tl(β ⁻) ²⁰⁴ Pb(α,n) ²⁰⁷ Po(β ⁺) ²⁰⁷ Bi 6,2 % ²⁰⁵ Tl(n,2n) ²⁰⁴ Tl(α,n) ²⁰⁷ Bi 29,4 % ²⁰⁵ Tl(n,2n) ²⁰⁴ Tl(β ⁻) ²⁰⁴ Pb(α,n) ²⁰⁷ Po(β ⁺) ²⁰⁷ Bi 4,4 % ²⁰⁵ Tl(α,n) ²⁰⁸ Bi(n,2n) ²⁰⁷ Bi 17,3 %

Tabelle 6. Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die Nachzerfallswärme

4.1.3 γ-Dosisrate

Wie schon der Umfang der folgenden Tabelle zeigt, reagiert die γ-Dosisrate am empfindlichsten auf die Einführung der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen. Das erklärt sich häufig daraus, daß die sequentiellen Reaktionen vermehrt zu Kernen führen, die über die Aussendung von Positronen zerfallen. Damit ist dann immer auch die Entstehung von Annihilationsstrahlung verbunden, die schnell einen wesentlichen Beitrag zur Dosisrate liefern kann. Wichtige Ausnahmen sind nur ¹⁰Be bei der Aktivierung von Lithium, ⁶⁰Co bei der Aktivierung von Mangan, und ⁹⁴Nb bei der Aktivierung von Yttrium. Im Falle von Lithium bilden die sequentiellen Reaktionen die einzige Möglichkeit überhaupt das Isotop ¹⁰Be zu produzieren, und bei Mangan und Yttrium wird der Produktionspfad für die jeweiligen Isotope erheblich verkürzt. Insgesamt enthält die Tabelle Einträge für 28 Elemente. Davon zeigen die folgenden 16 Elemente einen Zuwachs von mehr als einer Größenordnung: Li, N, O, F, Ne, Na, Mg, V, Mn, As, Y, Xe, Cs, Pt, Au und Tl. Er ist am größten für die Elemente Fluor (1,8 * 10¹¹ -fache Dosisrate), Natrium (1,5 * 10⁹ -fache Dosisrate) und Gold (1 300 000-fache Dosisrate).

γ-Dosisrate					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Li	3	0,001 - 10 ⁶	nur (x,n)	¹⁰ Be	⁷ Li(α,n) ¹⁰ B(n,p) ¹⁰ Be 99,6 %
N	7	0,001 - 0,003	5500	¹⁸ F	¹⁴ N(n, γ) ¹⁵ N(α,n) ¹⁸ F 5,5 % ¹⁵ N(α,n) ¹⁸ F 94,4 %
O	8	0,001 - 0,003	41	¹⁸ F	¹⁶ O(t,n) ¹⁸ F 34,4 % ¹⁶ O(n,d) ¹⁵ N(α,n) ¹⁸ F 11,3 % ¹⁷ O(d,n) ¹⁸ F 15,6 % ¹⁸ O(p,n) ¹⁸ F 35,0 % ¹⁸ O(n,2n) ¹⁷ O(d,n) ¹⁸ F 1,1 %
		0,003 - 5	1,4	²² Na	¹⁸ O(n, γ) ¹⁹ O(β ⁻) ¹⁹ F(α,n) ²² Na 85,0 % ¹⁸ O(d,n) ¹⁹ F(α,n) ²² Na 5,0 % ¹⁸ O(α,n) ²¹ Ne(d,n) ²² Na 9,9 %

γ-Dosisrate					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
F	9	0,003 - 100	$1,8 \cdot 10^{11}$	^{22}Na	$^{19}\text{F}(\alpha, n)^{22}\text{Na}$ 99,9 %
Ne	10	0,001 - 50	11	^{22}Na	$^{20}\text{Ne}(n, d)^{19}\text{F}(\alpha, n)^{22}\text{Na}$ 1,3 % $^{22}\text{Ne}(p, n)^{22}\text{Na}$ 89,3 %
		50 - 10^6	14	^{26}Al	$^{22}\text{Ne}(n, \gamma)^{23}\text{Ne}(\beta^-)^{23}\text{Na}(\alpha, n)^{26}\text{Al}$ 99,6 %
Na	11	100 - 10^6	$1,5 \cdot 10^9$	^{26}Al	$^{23}\text{Na}(\alpha, n)^{26}\text{Al}$ 99,9 %
Mg	12	50 - 10^6	29	^{26}Al	$^{26}\text{Mg}(p, n)^{26}\text{Al}$ 95,9 %
V	23	0,5 - 10	1800	^{54}Mn	$^{51}\text{V}(\alpha, n)^{54}\text{Mn}$ 99,5 %
Cr	24	2 - 10	1,1	^{54}Mn	$^{53}\text{Cr}(n, \gamma)^{54}\text{Cr}(p, n)^{54}\text{Mn}$ 1,0 % $^{53}\text{Cr}(p, n)^{53}\text{Mn}(n, \gamma)^{54}\text{Mn}$ 3,4 % $^{54}\text{Cr}(p, n)^{54}\text{Mn}$ 6,9 %
Mn	25	50 - 100	16	^{60}Co	$^{55}\text{Mn}(\alpha, n)^{58}\text{Co}(n, \gamma)^{59}\text{Co}(n, \gamma)^{60}\text{Co}$ 41,5 % $^{55}\text{Mn}(\alpha, n)^{58}\text{Co}(n, \gamma)^{59}\text{Co}(n, \gamma)^{60m}\text{Co}(\text{IT})$ ^{60}Co 50,6 %
		200 - 10^6	1,5	$^{60}\text{Fe}/^{60}\text{Co}$	$^{55}\text{Mn}(\alpha, n)^{58}\text{Co}(\beta^-)^{58}\text{Fe}(n, \gamma)^{59}\text{Fe}(n, \gamma)^{60}\text{Fe}$ 6,3 % $^{55}\text{Mn}(\alpha, n)^{58}\text{Co}(n, \gamma)^{59}\text{Co}(n, \gamma)^{60}\text{Co}(n, p)$ ^{60}Fe 12,6 % $^{55}\text{Mn}(\alpha, n)^{58}\text{Co}(n, \gamma)^{59}\text{Co}(n, \gamma)^{60m}\text{Co}(\text{IT})$ $^{60}\text{Co}(n, p)^{60}\text{Fe}$ 15,4 %
As	33	20 - 10^6	19	^{81}Kr	$^{75}\text{As}(n, \gamma)^{76}\text{As}(\beta^-)^{76}\text{Se}(n, \gamma)^{77}\text{Se}(n, \gamma)^{78}\text{Se}(\alpha, n)^{81}\text{Kr}$ 6,9 % $^{75}\text{As}(n, \gamma)^{76}\text{As}(\beta^-)^{76}\text{Se}(n, \gamma)^{77m}\text{Se}(\text{IT})$ $^{77}\text{Se}(n, \gamma)^{78}\text{Se}(\alpha, n)^{81}\text{Kr}$ 13,5 % $^{75}\text{As}(n, \gamma)^{76}\text{As}(\beta^-)^{76}\text{Se}(n, \gamma)^{77}\text{Se}(\alpha, n)$ $^{80}\text{Kr}(n, \gamma)^{81}\text{Kr}$ 7,4 % $^{75}\text{As}(n, \gamma)^{76}\text{As}(\beta^-)^{76}\text{Se}(n, \gamma)^{77}\text{Se}(\alpha, n)$ $^{80}\text{Kr}(n, \gamma)^{81m}\text{Kr}(\text{IT})^{81}\text{Kr}$ 2,4 % $^{75}\text{As}(n, \gamma)^{76}\text{As}(\beta^-)^{76}\text{Se}(n, \gamma)^{77m}\text{Se}(\text{IT})$ $^{77}\text{Se}(\alpha, n)^{80}\text{Kr}(n, \gamma)^{81}\text{Kr}$ 14,5 % $^{75}\text{As}(n, \gamma)^{76}\text{As}(\beta^-)^{76}\text{Se}(n, \gamma)^{77m}\text{Se}(\text{IT})$ $^{77}\text{Se}(\alpha, n)^{80}\text{Kr}(n, \gamma)^{81m}\text{Kr}(\text{IT})^{81}\text{Kr}$ 4,6 %
Y	39	500 - $3 \cdot 10^4$	8800	^{94}Nb	$^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, \gamma)^{93}\text{Nb}(n, \gamma)^{94}\text{Nb}$ 23,3 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, \gamma)^{93}\text{Nb}(n, \gamma)^{94m}\text{Nb}(\text{IT})^{94}\text{Nb}$ 51,9 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, \gamma)^{93m}\text{Nb}(n, \gamma)^{94}\text{Nb}$ 7,1 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, \gamma)^{93m}\text{Nb}(n, \gamma)^{94m}\text{Nb}(\text{IT})^{94}\text{Nb}$ 15,8 %
		$3 \cdot 10^4$ - 10^6	$4,6 \cdot 10^4$	^{92}Nb	$^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}$ 98,5 %
Zr	40	$3 \cdot 10^5$ - 10^6	6,6	^{92}Nb	$^{91}\text{Zr}(n, \gamma)^{92}\text{Zr}(p, n)^{92}\text{Nb}$ 1,0 % $^{91}\text{Zr}(p, n)^{91}\text{Nb}(n, \gamma)^{92}\text{Nb}$ 1,1 % $^{92}\text{Zr}(p, n)^{92}\text{Nb}$ 96,2 %

γ-Dosisrate					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Rh	45	100 - 500	1,1	^{108m} Ag	¹⁰³ Rh(n, γ) ¹⁰⁴ Rh(β ⁻) ¹⁰⁴ Pd(α,n) ¹⁰⁷ Cd(β ⁻) ¹⁰⁷ Ag(n, γ) ^{108m} Ag 4,7 % ¹⁰³ Rh(n, γ) ^{104m} Rh(IT) ¹⁰⁴ Rh(β ⁻) ¹⁰⁴ Pd(α,n) ¹⁰⁷ Cd(β ⁻) ¹⁰⁷ Ag(n, γ) ^{108m} Ag 4,7 %
Xe	54	3 000 - 10 ⁶	24	¹³⁸ La	¹³⁴ Xe(n,2n) ¹³³ Xe(β ⁻) ¹³³ Cs(n, γ) ¹³⁴ Cs(α,n) ¹³⁷ La(n, γ) ¹³⁸ La 1,4 % ¹³⁴ Xe(n,2n) ^{133m} Xe(IT) ¹³³ Xe(β ⁻) ¹³³ Cs(n, γ) ¹³⁴ Cs(α,n) ¹³⁷ La(n, γ) ¹³⁸ La 1,1 % ¹³⁴ Xe(n,2n) ¹³³ Xe(β ⁻) ¹³³ Cs(n, γ) ¹³⁴ Cs(n, γ) ¹³⁵ Cs(α,n) ¹³⁸ La 1,0 % ¹³⁴ Xe(n, γ) ¹³⁵ Xe(β ⁻) ¹³⁵ Cs(α,n) ¹³⁸ La 3,9 % ¹³⁴ Xe(n, γ) ^{135m} Xe(IT) ¹³⁵ Xe(β ⁻) ¹³⁵ Cs(α,n) ¹³⁸ La 3,0 % ¹³⁶ Xe(n,2n) ¹³⁵ Xe(β ⁻) ¹³⁵ Cs(α,n) ¹³⁸ La 25,7 % ¹³⁶ Xe(n,2n) ^{135m} Xe(IT) ¹³⁵ Xe(β ⁻) ¹³⁵ Cs(α,n) ¹³⁸ La 24,9 % ¹³⁶ Xe(α,n) ¹³⁹ Ba(β ⁻) ¹³⁹ La(n,2n) ¹³⁸ La 26,7 %
Cs	55	1 000 - 10 ⁶	1500	¹³⁸ La	¹³³ Cs(n, γ) ^{134m} Cs(IT) ¹³⁴ Cs(α,n) ¹³⁷ La(n, γ) ¹³⁸ La 6,3 % ¹³³ Cs(n, γ) ^{134m} Cs(IT) ¹³⁴ Cs(n, γ) ¹³⁵ Cs(α,n) ¹³⁸ La 4,9 % ¹³³ Cs(n, γ) ¹³⁴ Cs(α,n) ¹³⁷ La(n, γ) ¹³⁸ La 41,9 % ¹³³ Cs(n, γ) ¹³⁴ Cs(n, γ) ^{135m} Cs(IT) ¹³⁵ Cs(α,n) ¹³⁸ La 1,2 % ¹³³ Cs(n, γ) ¹³⁴ Cs(n, γ) ¹³⁵ Cs(α,n) ¹³⁸ La 32,9 % ¹³³ Cs(n, γ) ¹³⁴ Cs(β ⁻) ¹³⁴ Ba(α,n) ¹³⁷ Ce(β ⁺) ¹³⁷ La(n, γ) ¹³⁸ La 10,2 %
Pr	59	10 - 50	1,7	¹⁴⁶ Pm	¹⁴¹ Pr(α,n) ¹⁴⁴ Pm(n, γ) ¹⁴⁵ Pm(n, γ) ¹⁴⁶ Pm 94,3 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ¹⁴² Pr(β ⁻) ¹⁴² Nd(α,n) ¹⁴⁵ Sm(β ⁺) ¹⁴⁵ Pm(n, γ) ¹⁴⁶ Pm 1,8 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ^{142m} Pr(IT) ¹⁴² Pr(β ⁻) ¹⁴² Nd(α,n) ¹⁴⁵ Sm(β ⁺) ¹⁴⁵ Pm(n, γ) ¹⁴⁶ Pm 1,8 %
		20 - 50	1,9	¹⁵⁴ Eu	lange Reaktionsketten
Nd	60	500 - 1 000	1,1	¹⁵⁸ Tb	lange Reaktionsketten
		3 000 - 10 ⁴	1,3	^{166m} Ho	lange Reaktionsketten
Sm	62	3 000 - 3*10 ⁴	1,2	^{166m} Ho	lange Reaktionsketten
Eu	63	3 000 - 3*10 ⁴	1,2	^{166m} Ho	lange Reaktionsketten
		10 ⁵	1,3	¹⁶³ Ho	lange Reaktionsketten
		3*10 ⁵ - 10 ⁶	1,8	¹⁷⁶ Lu	lange Reaktionsketten

γ -Dosisrate					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Gd	64	$3 \cdot 10^5 - 10^6$	1,3	^{176}Lu	lange Reaktionsketten
Tb	65	$3 \cdot 10^5 - 10^6$	1,3	^{176}Lu	lange Reaktionsketten
Dy	66	$3 \cdot 10^5 - 10^6$	1,1	^{176}Lu	lange Reaktionsketten
Ho	67	$3 \cdot 10^5 - 10^6$	1,1	^{176}Lu	lange Reaktionsketten
Pt	78	$10^4 - 3 \cdot 10^5$	$4,4 \cdot 10^4$	$^{202}\text{Pb}/^{202}\text{Tl}$	$^{198}\text{Pt}(n, \gamma)^{199\text{m}}\text{Pt}(\text{IT})^{199}\text{Pt}(\beta^-)^{199}\text{Au}(\beta^-)$ $^{199}\text{Hg}(\alpha, n)^{202}\text{Pb}$ 70,3 % $^{198}\text{Pt}(n, \gamma)^{199}\text{Pt}(\beta^-)^{199}\text{Au}(\beta^-)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)$ ^{202}Pb 8,0 % $^{196}\text{Pt}(n, \gamma)^{197}\text{Pt}(\beta^-)^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}(n, \gamma)$ $^{199}\text{Au}(\beta^-)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)^{202}\text{Pb}$ 5,9 %
Au	79	$10^4 - 3 \cdot 10^5$	$1,3 \cdot 10^6$	$^{202}\text{Pb}/^{202}\text{Tl}$	$^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}(n, \gamma)^{199}\text{Au}(\beta^-)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)$ ^{202}Pb 54,8 % $^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}(\beta^-)^{198}\text{Hg}(n, \gamma)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)$ ^{202}Pb 29,9 % $^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}(\beta^-)^{198}\text{Hg}(n, \gamma)^{199\text{m}}\text{Hg}(\text{IT})$ $^{199}\text{Hg}(n, \gamma)^{202}\text{Pb}$ 10,2 %
Hg	80	$10^4 - 10^5$	1,3	$^{202}\text{Pb}/^{202}\text{Tl}$	$^{198}\text{Hg}(n, \gamma)^{199}\text{Hg}(\alpha, n)^{202}\text{Pb}$ 2,2 % $^{199}\text{Hg}(\alpha, n)^{202}\text{Pb}$ 18,6 %
Tl	81	5 - 200 $3 \cdot 10^5$	17 1,1	^{207}Bi ^{208}Bi	$^{203}\text{Tl}(n, \gamma)^{204}\text{Tl}(\alpha, n)^{207}\text{Bi}$ 40,5 % $^{203}\text{Tl}(n, \gamma)^{204}\text{Tl}(\beta^-)^{204}\text{Pb}(\alpha, n)^{207}\text{Po}(\beta^+)^{207}\text{Bi}$ 6,2 % $^{205}\text{Tl}(n, 2n)^{204}\text{Tl}(\alpha, n)^{207}\text{Bi}$ 29,4 % $^{205}\text{Tl}(n, 2n)^{204}\text{Tl}(\beta^-)^{204}\text{Pb}(\alpha, n)^{207}\text{Po}(\beta^+)$ ^{207}Bi 4,4 % $^{205}\text{Tl}(\alpha, n)^{208}\text{Bi}(n, 2n)^{207}\text{Bi}$ 17,3 % $^{205}\text{Tl}(\alpha, n)^{208}\text{Bi}$ 99,5 %

Tabelle 7. Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die γ -Dosisrate

4.1.4 Inkorporations- und Inhalationsdosis

Inkorporations- und Inhalationsdosis vermitteln einen Eindruck welche Wirkung radioaktives Material bei der Aufnahme in den Körper hat. Hierzu müssen neben der γ -Strahlung auch die α - und β -Strahlung berücksichtigt werden, die bei der γ -Dosisrate wegen ihrer geringen Reichweite nicht beachtet werden. Die γ -Dosisrate beschreibt eher den Effekt einer äußerlichen Kontamination. Die beiden folgenden Tabellen enthalten Einträge für jeweils 13 Elemente. Für beide Größen zeigen die sieben Elemente Li, Na, Mg, V, Cr, Y und Au Zuwächse von mehr als einer Größenordnung. Die Spitzenreiter sind für die Inkorporationsdosis: Natrium (130 000-fache Dosis), Gold (84 000-fache Dosis) und Vanadin (10 000-fache Dosis), und für die Inhalationsdosis: Gold (82 000-fache Dosis), Vanadin (47 000-fache Dosis) und Natrium (15 000-fache Dosis).

Inkorporationsdosis					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Li	3	1 000 - 10 ⁶	nur (x,n)	¹⁰ Be	⁷ Li(α,n) ¹⁰ B(n,p) ¹⁰ Be 99,6 %
Ne	10	0,001 - 5	1,6	²² Na	²⁰ Ne(n,d) ¹⁹ F(α,n) ²² Na 1,3 % ²² Ne(p,n) ²² Na 89,3 %
Na	11	200 - 10 ⁶	1,3 * 10 ⁵	²⁶ Al	²³ Na(α,n) ²⁶ Al 99,9 %
Mg	12	200 - 10 ⁶	29	²⁶ Al	²⁶ Mg(p,n) ²⁶ Al 95,9 %
V	23	3 000 - 10 ⁶	1,0 * 10 ⁴	⁵³ Mn	⁵⁰ V(α,n) ⁵³ Mn 1,0 % ⁵¹ V(n,2n) ⁵⁰ V(α,n) ⁵³ Mn 31,2 % ⁵¹ V(n,γ) ⁵² V(β ⁻) ⁵² Cr(d,n) ⁵³ Mn 23,4 % ⁵¹ V(α,n) ⁵⁴ Mn(n,2n) ⁵³ Mn 34,1 %
Cr	24	500 - 10 ⁶	89	⁵³ Mn	⁵³ Cr(p,n) ⁵³ Mn 88,5 % ⁵² Cr(n,γ) ⁵³ Cr(p,n) ⁵³ Mn 1,3 % ⁵² Cr(d,n) ⁵³ Mn 7,2 %
Y	39	1 000 - 3 000	150	⁹¹ Nb	⁸⁹ Y(n,2n) ⁸⁸ Y(α,n) ⁹¹ Nb 8,7 % ⁸⁹ Y(n,γ) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(d,n) ⁹¹ Nb 5,8 % ⁸⁹ Y(n,γ) ^{90m} Y(IT) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(d,n) ⁹¹ Nb 1,6 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,2n) ⁹¹ Nb 49,3 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,2n) ^{91m} Nb(IT) ⁹¹ Nb 33,0 %
		3 000	60	⁹³ Mo	⁸⁹ Y(n,γ) ^{90m} Y(IT) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(α,n) ⁹³ Mo 21,5 % ⁸⁹ Y(n,γ) ⁹⁰ Y(β ⁻) ⁹⁰ Zr(α,n) ⁹³ Mo 76,8 %
		3 000 - 3*10 ⁴	24	⁹⁴ Nb	⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,γ) ⁹³ Nb(n,γ) ⁹⁴ Nb 23,3 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,γ) ⁹³ Nb(n,γ) ^{94m} Nb(IT) ⁹⁴ Nb 51,9 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,γ) ^{93m} Nb(n,γ) ⁹⁴ Nb 7,1 % ⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb(n,γ) ^{93m} Nb(n,γ) ^{94m} Nb(IT) ⁹⁴ Nb 15,8 %
		10 ⁵ - 10 ⁶	9,0	⁹² Nb	⁸⁹ Y(α,n) ⁹² Nb 98,5 %
Ho	67	3*10 ⁵ - 10 ⁶	1,1	¹⁷⁶ Lu	lange Reaktionsketten
Pt	78	10 ⁴ - 10 ⁵	2,6	²⁰² Pb	¹⁹⁸ Pt(n,γ) ^{199m} Pt(IT) ¹⁹⁹ Pt(β ⁻) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 70,3 % ¹⁹⁸ Pt(n,γ) ¹⁹⁹ Pt(β ⁻) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 8,0 % ¹⁹⁶ Pt(n,γ) ¹⁹⁷ Pt(β ⁻) ¹⁹⁷ Au(n,γ) ¹⁹⁸ Au(n,γ) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 5,9 %
Au	79	10 ⁴ - 10 ⁶	8,4 * 10 ⁴	²⁰² Pb	¹⁹⁷ Au(n,γ) ¹⁹⁸ Au(n,γ) ¹⁹⁹ Au(β ⁻) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 54,8 % ¹⁹⁷ Au(n,γ) ¹⁹⁸ Au(β ⁻) ¹⁹⁸ Hg(n,γ) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 29,9 % ¹⁹⁷ Au(n,γ) ¹⁹⁸ Au(β ⁻) ¹⁹⁸ Hg(n,γ) ^{199m} Hg(IT) ¹⁹⁹ Hg(n,γ) ²⁰² Pb 10,2 %
Hg	80	10 ⁴ - 10 ⁵	1,3	²⁰² Pb	¹⁹⁸ Hg(n,γ) ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 2,2 % ¹⁹⁹ Hg(α,n) ²⁰² Pb 18,6 %

Inkorporationsdosis					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Tl	81	200	1,3	^{209}Po	$^{205}\text{Tl}(n, \gamma)^{206}\text{Tl}(\beta^-)^{206}\text{Pb}(\alpha, n)^{209}\text{Po}$ 99,4 %
Pb	82	50 - 500	2,0	^{209}Po	$^{206}\text{Pb}(\alpha, n)^{209}\text{Po}$ 60,4 % $^{207}\text{Pb}(n, 2n)^{206}\text{Pb}(\alpha, n)^{209}\text{Po}$ 1,6 %

Tabelle 8. Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die Inkorporationsdosis

Inhalationsdosis					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Li	3	500 - 10^6	nur (x,n)	^{10}Be	$^7\text{Li}(\alpha, n)^{10}\text{B}(n, p)^{10}\text{Be}$ 99,6 %
Ne	10	0,001 - 5	1,4	^{22}Na	$^{20}\text{Ne}(n, d)^{19}\text{F}(\alpha, n)^{22}\text{Na}$ 1,3 % $^{22}\text{Ne}(p, n)^{22}\text{Na}$ 89,3 %
Na	11	200 - 10^6	$1,5 \cdot 10^4$	^{26}Al	$^{23}\text{Na}(\alpha, n)^{26}\text{Al}$ 99,9 %
Mg	12	100 - 10^6	29	^{26}Al	$^{26}\text{Mg}(p, n)^{26}\text{Al}$ 95,9 %
V	23	1 000 - 10^6	$4,7 \cdot 10^4$	^{53}Mn	$^{50}\text{V}(\alpha, n)^{53}\text{Mn}$ 1,0 % $^{51}\text{V}(n, 2n)^{50}\text{V}(\alpha, n)^{53}\text{Mn}$ 31,2 % $^{51}\text{V}(n, \gamma)^{52}\text{V}(\beta^-)^{52}\text{Cr}(d, n)^{53}\text{Mn}$ 23,4 % $^{51}\text{V}(\alpha, n)^{54}\text{Mn}(n, 2n)^{53}\text{Mn}$ 34,1 %
Cr	24	10 500 - 10^6	1,1 89	^{55}Fe ^{53}Mn	$^{52}\text{Cr}(\alpha, n)^{55}\text{Fe}$ 90,5 % $^{53}\text{Cr}(p, n)^{53}\text{Mn}$ 88,5 % $^{52}\text{Cr}(n, \gamma)^{53}\text{Cr}(p, n)^{53}\text{Mn}$ 1,3 % $^{52}\text{Cr}(d, n)^{53}\text{Mn}$ 7,2 %
Y	39	500 - 3 000 10 ⁴ 3*10 ⁴ 10 ⁵ - 10 ⁶	260 26 13 5,8	^{91}Nb ^{93}Mo ^{94}Nb ^{92}Nb	$^{89}\text{Y}(n, 2n)^{88}\text{Y}(\alpha, n)^{91}\text{Nb}$ 8,7 % $^{89}\text{Y}(n, \gamma)^{90}\text{Y}(\beta^-)^{90}\text{Zr}(d, n)^{91}\text{Nb}$ 5,8 % $^{89}\text{Y}(n, \gamma)^{90m}\text{Y}(IT)^{90}\text{Y}(\beta^-)^{90}\text{Zr}(d, n)^{91}\text{Nb}$ 1,6 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, 2n)^{91}\text{Nb}$ 49,3 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, 2n)^{91m}\text{Nb}(IT)^{91}\text{Nb}$ 33,0 % $^{89}\text{Y}(n, \gamma)^{90m}\text{Y}(IT)^{90}\text{Y}(\beta^-)^{90}\text{Zr}(\alpha, n)^{93}\text{Mo}$ 21,5 % $^{89}\text{Y}(n, \gamma)^{90}\text{Y}(\beta^-)^{90}\text{Zr}(\alpha, n)^{93}\text{Mo}$ 76,8 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, \gamma)^{93}\text{Nb}(n, \gamma)^{94}\text{Nb}$ 23,3 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, \gamma)^{93}\text{Nb}(n, \gamma)^{94m}\text{Nb}(IT)^{94}\text{Nb}$ 51,9 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, \gamma)^{93m}\text{Nb}(n, \gamma)^{94}\text{Nb}$ 7,1 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}(n, \gamma)^{93m}\text{Nb}(n, \gamma)^{94m}\text{Nb}(IT)^{94}\text{Nb}$ 15,8 % $^{89}\text{Y}(\alpha, n)^{92}\text{Nb}$ 98,5 %

Inhalationsdosis					
Element	Z	Zeitraum des Auftretens (Jahre)	maximaler Zuwachsfaktor	Radioisotop	Entstehung
Pr	59	10 - 20	1,2	¹⁴⁵ Pm	¹⁴¹ Pr(α ,n) ¹⁴⁴ Pm(n, γ) ¹⁴⁵ Pm 95,5 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ¹⁴² Pr(β^-) ¹⁴² Nd(α ,n) ¹⁴⁵ Sm(β^+) ¹⁴⁵ Pm 2,0 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ^{142m} Pr(IT) ¹⁴² Pr(β^-) ¹⁴² Nd(α ,n) ¹⁴⁵ Sm(β^+) ¹⁴⁵ Pm 2,0 %
		10 ⁶	1,1	¹⁴⁶ Pm ¹⁴⁶ Sm	¹⁴¹ Pr(α ,n) ¹⁴⁴ Pm(n, γ) ¹⁴⁵ Pm(n, γ) ¹⁴⁶ Pm 94,3 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ¹⁴² Pr(β^-) ¹⁴² Nd(α ,n) ¹⁴⁵ Sm(β^+) ¹⁴⁵ Pm(n, γ) ¹⁴⁶ Pm 1,8 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ^{142m} Pr(IT) ¹⁴² Pr(β^-) ¹⁴² Nd(α ,n) ¹⁴⁵ Sm(β^+) ¹⁴⁵ Pm(n, γ) ¹⁴⁶ Pm 1,8 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ^{142m} Pr(IT) ¹⁴² Pr(β^-) ¹⁴² Nd(α ,n) ¹⁴⁵ Sm(n, γ) ¹⁴⁶ Sm 41,8 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ^{142m} Pr(IT) ¹⁴² Pr(β^-) ¹⁴² Nd(n, γ) ¹⁴³ Nd(α ,n) ¹⁴⁶ Sm 2,6 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ¹⁴² Pr(β^-) ¹⁴² Nd(α ,n) ¹⁴⁵ Sm(n, γ) ¹⁴⁶ Sm 41,8 % ¹⁴¹ Pr(n, γ) ¹⁴² Pr(β^-) ¹⁴² Nd(n, γ) ¹⁴³ Nd(α ,n) ¹⁴⁶ Sm 2,6 % ¹⁴¹ Pr(α ,n) ¹⁴⁴ Pm(n, γ) ¹⁴⁵ Pm(n, γ) ¹⁴⁶ Pm(β^-) ¹⁴⁶ Sm 9,0 %
Ho	67	3*10 ⁵ - 10 ⁶	1,1	¹⁷⁶ Lu	lange Reaktionsketten
Au	79	10 ⁴ - 10 ⁶	8,2 * 10 ⁴	²⁰² Pb	¹⁹⁷ Au(n, γ) ¹⁹⁸ Au(n, γ) ¹⁹⁹ Au(β^-) ¹⁹⁹ Hg(α ,n) ²⁰² Pb 54,8 % ¹⁹⁷ Au(n, γ) ¹⁹⁸ Au(β^-) ¹⁹⁸ Hg(n, γ) ¹⁹⁹ Hg(α ,n) ²⁰² Pb 29,9 % ¹⁹⁷ Au(n, γ) ¹⁹⁸ Au(β^-) ¹⁹⁸ Hg(n, γ) ^{199m} Hg(IT) ¹⁹⁹ Hg(n, γ) ²⁰² Pb 10,2 %
Hg	80	10 ⁴ - 10 ⁵	1,3	²⁰² Pb	¹⁹⁸ Hg(n, γ) ¹⁹⁹ Hg(α ,n) ²⁰² Pb 2,2 % ¹⁹⁹ Hg(α ,n) ²⁰² Pb 18,6 %
Tl	81	100 - 200	1,6	²⁰⁹ Po	²⁰⁵ Tl(n, γ) ²⁰⁶ Tl(β^-) ²⁰⁶ Pb(α ,n) ²⁰⁹ Po 99,4 %
Pb	82	50 - 500	2,3	²⁰⁹ Po	²⁰⁶ Pb(α ,n) ²⁰⁹ Po 60,4 %
					²⁰⁷ Pb(n,2n) ²⁰⁶ Pb(α ,n) ²⁰⁹ Po 1,6 %

Tabelle 9. Ergebnisse der Aktivierungsrechnungen für die Inhalationsdosis

4.1.5 Vergleich der Einzelergebnisse

Um einen Überblick zu gewinnen, wurden die Ergebnisse der vorhergehenden Abschnitte in Tabelle 10 auf Seite 32 noch einmal zusammengefaßt. Dabei erkennt man, daß der Effekt der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen an das Vorhandensein langlebiger Radioisotope gekoppelt ist, die über neutroneninduzierte Reaktionen nur schwer zu erreichen sind. Dadurch werden die Überlegungen zu Beginn des Kapitels 3 bestätigt. Desweiteren kann man feststellen, daß die größten Änderungen im Zusammenhang mit

(α ,n)-Reaktionen auftreten, was sich dadurch erklärt, daß die (α ,n)-Reaktion in Konkurrenz zu einer Reaktionskette aus mindestens drei (n, γ)-Reaktionen und zwei β -Zerfällen steht. Auch (p,n)-Reaktionen spielen in vielen Fällen eine wichtige Rolle. Der Effekt ist jedoch meist kleiner, da die (p,n)-Reaktion mit Reaktionsketten aus mindestens einer (n, γ)-Reaktion, einem β -Zerfall und einer (n,2n)-Reaktion konkurriert. Reaktionen mit d, t und ^3He spielen nur in Ausnahmefällen eine Rolle, weil die Flüsse und die Energien dieser Teilchen kleiner, die Schwellen der entsprechenden (x,n)-Reaktionen aber höher sind, sodaß wesentlich geringere Reaktionsraten entstehen.

Element	Aktivität	Nachwärme	γ -Dosisrate	Inkorporationsdosis	Inhalationsdosis	Isotop	Element	Aktivität	Nachwärme	γ -Dosisrate	Inkorporationsdosis	Inhalationsdosis	Isotop
Li	+	+	+	+	+	^{10}Be	Cs			+			^{138}La
B	o					^{14}C	Pr			o		o	^{146}Pm
N			+			^{18}F	Nd		o	o			$^{166\text{m}}\text{Ho}$
O			+			$^{18}\text{F} / ^{22}\text{Na}$	Sm	o	o	o			$^{166\text{m}}\text{Ho}$
F		o	1			^{22}Na	Eu	o	o	o			$^{166\text{m}}\text{Ho}$ (^{176}Lu D)
Ne		o	+	o	o	$^{22}\text{Na} / ^{26}\text{Al}$	Gd			o			^{176}Lu
Na	2	1	2	1	3	^{26}Al	Tb	o		o			^{176}Lu
Mg	+	+	+	+	+	^{26}Al	Dy			o			^{176}Lu
V	1	3	+	3	2	^{53}Mn (^{54}Mn D)	Ho	o	o	o	o	o	^{176}Lu
Cr	+	+	o	+	+	^{53}Mn (^{54}Mn D)	Re	o					^{193}Pt
Mn			+			$^{60}\text{Co} / ^{60}\text{Fe}$	Pt	o	o	+	o		^{202}Pb
As			+			^{81}Kr	Au	3	2	3	2	1	^{202}Pb
Y	+	+	o	+	+	^{91}Nb (^{92}Nb D)	Hg	o	o	o	o	o	^{202}Pb
Zr			o			^{92}Nb	Tl		o	+	o	o	^{207}Bi (^{209}Po I)
Rh			o			$^{108\text{m}}\text{Ag}$	Pb				o	o	^{209}Po
Xe			+			^{138}La							

Tabelle 10. Übersicht über den Effekt der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen: Die mit einem Kreis (o) gekennzeichneten Elemente haben einen Zuwachs von mehr als 10 % in der betreffenden Größe, die mit einem Pluszeichen (+) einen Zuwachs von mehr als einer Größenordnung. Die Zahlen 1, 2 und 3 bezeichnen die Elemente mit dem größten, zweitgrößten beziehungsweise drittgrößten Effekt in der betreffenden Größe. Die mit einem D versehenen Isotope sind für den Effekt bei der γ -Dosisrate verantwortlich, die mit I für den Effekt bei Inkorporations- und Inhalationsdosis.

Besonders hinzuweisen ist auf die leichten Elemente Wasserstoff, Helium, Lithium und Beryllium. Die Ergebnisse für diese Elemente sind noch mit besonders großen Fehlern behaftet, da hier noch wesentliche Eingabedaten fehlen. Eine Berechnung der fehlenden Daten mit dem Programm ALICE ist aus prinzipiellen Gründen nicht möglich. ALICE be-

ruht auf einem statistischen Kernmodell. Die leichten Kerne der vier Elemente können jedoch auf Grund der geringen Zahl von Kernteilchen (maximal 10) nicht mehr als statistisches Ensemble angesehen werden. Gerade für das Element Lithium ist eine Verbesserung der Ergebnisse dringend geboten, da Lithium als Tritiumbrutmaterial und eventuell als Kühlmittel bei der Fusion eingesetzt werden wird. Trotz der noch unzureichenden Datenbasis zeigen sich bei Lithium bereits jetzt Effekte. Dabei wurden bisher zwei mit Sicherheit wichtige Reaktionskanäle wegen der fehlenden Wirkungsquerschnitte noch nicht berücksichtigt. Es handelt sich dabei um die (t,n)- und die (t, γ)-Reaktionen an Lithium. Die sequentiellen Reaktionen spielen für Lithium deshalb eine so große Rolle, weil schwerere Kerne nur auf diesem Wege gebildet werden können. Besondere Bedeutung kommt dabei der Bildung des langlebigen, radioaktiven Isotops ^{10}Be zu, das allein für die γ -Dosisrate verantwortlich ist, und das, obwohl beim Zerfall keine γ -Strahlung aus dem Kern austritt. Die entstehende γ -Strahlung ist das Ergebnis der Bremsstrahlung der Elektronen aus dem β^- -Zerfall.

Isotop	$T_{1/2}$	Zerfall	Isotop	$T_{1/2}$	Zerfall
^{10}Be	$1,6 \cdot 10^6$ a	β^- , keine γ 's	^{92}Nb	$3,6 \cdot 10^7$ a	EC
^{14}C	5730 a	β^- , keine γ 's	$^{108\text{m}}\text{Ag}$	127 a	EC, IT
^{18}F	109,7 m	β^+	^{138}La	$1,35 \cdot 10^{11}$ a	EC, β^-
^{22}Na	2,602 a	β^+	^{146}Pm	$1,03 \cdot 10^8$ a	α
^{26}Al	$7,16 \cdot 10^5$ a	β^+	$^{166\text{m}}\text{Ho}$	1200 a	β^-
^{53}Mn	$3,7 \cdot 10^6$ a	EC, keine γ 's	^{176}Lu	$3,6 \cdot 10^{10}$ a	β^-
^{54}Mn	312,2 d	EC	^{193}Pt	50 a	EC, keine γ 's
^{60}Fe	10^5 a	β^-	^{202}Pb	$3 \cdot 10^5$ a	EC, keine γ 's
^{60}Co	5,272 a	β^-	^{202}Tl	12,23 d	EC
^{81}Kr	$2,1 \cdot 10^5$ a	EC	^{207}Bi	33,4 a	EC
^{91}Nb	680 a	EC	^{209}Po	102 a	α

Tabelle 11. Die wichtigsten radioaktiven Isotope: für den Effekt der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen. Die Abkürzung EC steht für Elektroneneinfang (electron capture) und IT für isomeren Übergang (isomeric transition).

In Tabelle 11 sind die Halbwertszeiten ($T_{1/2}$) und Zerfallskanäle für die wichtigsten radioaktiven Isotope angegeben, die für die sequentiellen Reaktionen eine Rolle spielen. Da ein radioaktiver Zerfall normalerweise auch mit der Aussendung von γ -Quanten aus dem Kern verbunden ist, wurde dies nicht extra erwähnt. Stattdessen wurden die Fälle gekennzeichnet, wo keine γ -Quanten aus dem Kern austreten. An dieser Stelle sei auf einen weiteren Datenmangel hingewiesen. Für eine größere Anzahl von Produktkernen, die durch die sequentiellen Reaktionen entstehen können sind in der Zerfallsdatenbibliothek EAF2DECAY1 keine Einträge enthalten. Als wichtigstes Beispiel sei hier das Isotop ^7Be genannt, das allein über sequentielle Reaktionen geladener Teilchen gebildet werden kann. Es wird über die (p,n)-Reaktion aus ^7Li gebildet und spielt für die Anfangsaktivität und die anfängliche γ -Dosisrate eine wichtige Rolle. Eine entsprechende Erweiterung dieser Bibliothek erscheint deshalb notwendig.

In der Zusammenfassung in Tabelle 10 auf Seite 32 erkennt man, daß sich die größten Effekte bei den Elementen Fluor (F), Natrium (Na), Vanadin (V) und Gold (Au) zeigen. Von diesen vier Elementen ist Vanadin von besonderem Interesse, weil es als Legierungselement für Eisenbasislegierungen und als Basis für Vanadinlegierungen eine wichtige Rolle spielt. Vanadin und Chrom gehören zu den wenigen Elementen, deren Radioaktivität sehr schnell abnimmt und auf ein sehr niedriges Niveau sinkt. Abbildung 8 auf Seite 34 zeigt den Vergleich zwischen den Rechenergebnissen ohne und mit den sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen bei Vanadin für die Aktivität, die Nachzerfallswärme und die γ -Dosisrate sowie die γ -Dosisrate für das Element Fluor.

Bei der Aktivität und der Nachzerfallswärme von Vanadin sieht man, daß die Zuwachsfaktoren deshalb so groß sind, weil die Radioaktivität ohne die sequentiellen Reaktionen auf einen extrem niedrigen Wert absinkt. Aber auch mit den sequentiellen Reaktionen bleiben die Werte für Vanadin noch sehr niedrig. Wichtiger erscheint, daß durch die vermehrte Produktion von ^{54}Mn der Zeitpunkt für das Unterschreiten des 'Hands-on levels' bei der γ -Dosisrate für Vanadin verschoben wird. Der 'Hands-on level' ist ein Kriterium

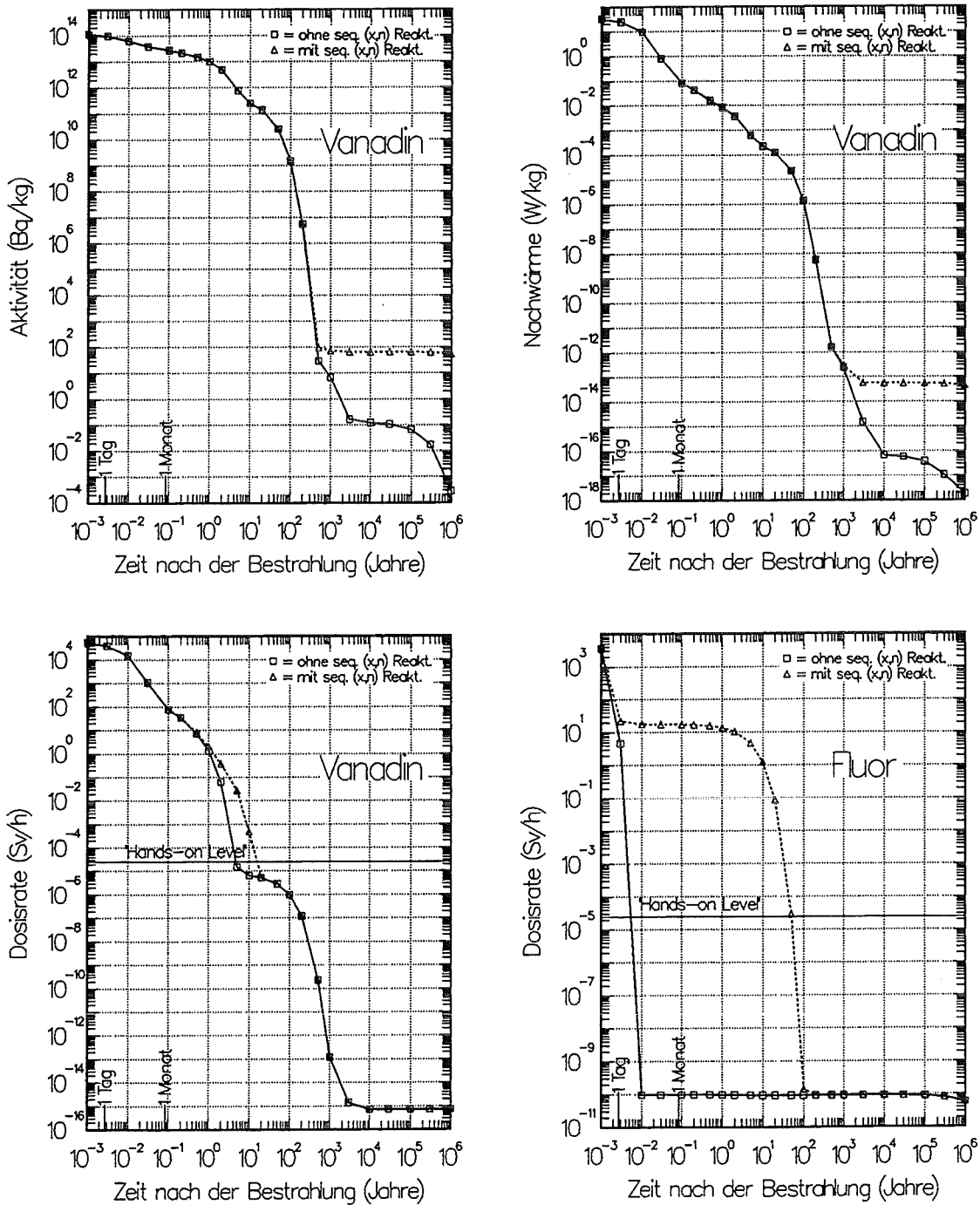


Abbildung 8. Darstellung der Ergebnisse für Vanadin und Fluor: Die Abbildung zeigt den Vergleich der Rechenergebnisse ohne und mit den sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen bei Vanadin für die Aktivität, die Nachzerfallswärme und die γ -Dosisrate sowie die γ -Dosisrate für das Element Fluor.

um abzuschätzen, ab wann ein Hantieren mit dem betreffenden Material ohne Schutzmaßnahmen wieder möglich ist. Der Wert für dieses Kriterium ist $25 \mu\text{Sv/h}$. Das spätere Unterschreiten des Hands-on levels bedeutet, daß das verstrahlte Material länger zwischengelagert werden muß, bevor es wiederverwendet werden kann.

Fluor war für diese Arbeit deshalb von besonderem Interesse, da es bei der γ -Dosisrate den größten Effekt zeigt (11 Größenordnungen, vgl. Abbildung 8 auf Seite 34). Ein solch großer Effekt sollte experimentell relativ leicht nachweisbar sein. Deshalb wurde Fluor als erstes Material für die Aktivierungsexperimente ausgewählt. In Kapitel 5 wird gezeigt, daß der Effekt tatsächlich in der erwarteten Größenordnung auftritt.

Ein weiterer Punkt, der für die Materialkunde von Bedeutung ist, ist die Frage, ob sich bei der Umwandlung der Elemente, den Transmutationen, ebenfalls Effekte durch die Einführung der sequentiellen Reaktionen zeigen. Denn werden genügend große Mengen eines Elementes umgewandelt, so verändern sich die mechanischen, thermischen und chemischen Eigenschaften des Materials. Unter den für die Rechnungen gewählten Bedingungen werden bei immerhin sieben Elementen, nämlich In, Eu, Ho, Tm, Ta, Ir und Au, mehr als 90 % des Materials in andere Elemente umgewandelt, weitere 21 Elemente zeigen Umwandlungsraten zwischen 10 % und 90 %. Bei der Untersuchung dieses Aspektes zeigt sich, daß zwar durch die sequentiellen Reaktionen mehr Isotope und zusätzliche Elemente produziert werden. Die Effekte liegen jedoch, anders als bei den Transmutationen, die durch die Neutronen verursacht werden, alle unterhalb 1 appm, zum Teil um viele Größenordnungen darunter. Obwohl diese Effekte für die Radiologie der Materialien, wie oben gezeigt, deutliche Auswirkungen haben können, sind sie doch zu klein um für die mechanischen, thermischen und chemischen Materialeigenschaften eine nennenswerte Rolle spielen zu können.

Zusammenfassend sei noch einmal festgehalten, daß 31 von 81 untersuchten Elementen in wenigstens einer der fünf Größen Aktivität, Nachzerfallswärme, γ -Dosisrate, Inkorporations- und Inhalationsdosis einen Zuwachs von mindestens 10 % aufweisen, davon 17 Elemente einen Zuwachs von mehr als einer Größenordnung. Von diesen Elementen sind Lithium, Fluor, Vanadin, Chrom und Mangan für die Fusion möglicherweise von Interesse. Dabei wird Lithium, rein oder in Verbindungen, als Brutmaterial für Tritium benötigt, Fluor vielleicht in Verbindung mit Lithium und Beryllium als Kühlmittel und Brutmaterial FLiBe, wobei Beryllium als Neutronenmultiplikator dient. Chrom und Mangan sind mögliche Legierungselemente und Vanadin ist als Legierungsbasis für neue Legierungen und als Legierungselement in der Diskussion. Welche Bedeutung die Effekte in einem konkreten Fall haben, hängt jedoch von weiteren Faktoren ab wie der Reinheit des Materials, der Art der Verunreinigungen und der Zusammensetzung der Legierungen. Sie sind aber nicht von vorneherein zu vernachlässigen. Dies gilt besonders für das Element Lithium, bei dem weitere Anstrengungen notwendig sind, um die Ergebnisse zu verbessern. Da es als Brutmaterial verwendet wird, bedarf es zuverlässiger Vorhersagen über das Verhalten dieses Materials. Auf Vanadin wird im Zusammenhang mit Legierungen im nächsten Abschnitt noch einmal eingegangen. Darüberhinaus waren Fluor, Vanadin und Chrom zusammen mit Eisen Gegenstand der Aktivierungsexperimente über die in Kapitel 5 berichtet wird.

4.2 Bewertung von Strukturmaterialien unter radiologischen Gesichtspunkten

Radiologische Gesichtspunkte spielen vor allem eine wichtige Rolle für diejenigen Materialien, die für den Bau von Komponenten mit einer hohen Belastung durch Neutronenbestrahlung vorgesehen sind. Solche Komponenten sind neben anderen die erste Wand des Reaktors und das dahinterliegende Blanket mit dem Tritiumbrutmaterial. Für die verschiedenen Strukturen in diesem Bereich sind eine ganze Anzahl von Werkstoffen

in der Diskussion. Im folgenden wird versucht einen knappen Überblick über die verschiedenen Werkstoffgruppen zu geben. Danach wird unter zwei speziellen Gesichtspunkten auf die beiden Gruppen der ferritisch-martensitischen Stähle und der Vanadinbasislegierungen eingegangen.

4.2.1 Überblick über die verschiedenen Werkstoffgruppen

Bei der Bewertung und Auswahl von Werkstoffen für die hochbelasteten Komponenten eines Fusionsreaktors müssen viele Faktoren berücksichtigt werden: mechanische und thermische Eigenschaften des Materials, seine Widerstandsfähigkeit gegen chemische Angriffe wie zum Beispiel Korrosion, Erfahrung bei der Herstellung und im Umgang mit dem Material, seine Kompatibilität mit anderen Werkstoffen, seine Umweltverträglichkeit, seine Wirtschaftlichkeit und seine radiologischen Eigenschaften. Um die zuletzt genannten Eigenschaften zu bewerten, werden Größen wie die Aktivität, die Nachzerfallswärme, die γ -Dosisrate, die Inkorporations- und die Inhalationsdosis und die Transmutationsraten herangezogen. Wichtig ist dabei auch deren zeitlicher Verlauf. Desweiteren muß berücksichtigt werden, wie sich das Material bei Kontakt mit Wasserstoff und Helium verhält, und wieviel von diesen Gasen durch die Neutronen produziert wird. Bei derart vielfältigen Anforderungen wird es kaum möglich sein, ein Material zu finden, daß alle Anforderungen optimal erfüllt. Stattdessen wird man abwägen müssen, welche Eigenschaften eines Materials vorteilhaft sind, und ob die Nachteile des Materials in Kauf genommen werden können. Besonders aussagefähig in Bezug auf die radiologischen Eigenschaften sind die Nachzerfallswärme und die γ -Dosisrate, weil sie die Wirkung der radioaktiven Zerfälle beschreiben. Vergleicht man nun die natürlich vorkommenden Elemente bezüglich dieser beiden Größen, stellt man fest, daß es nur wenige Elemente gibt, die den Anforderungen wenigstens teilweise genügen. Zu diesen Anforderungen gehört, daß die γ -Dosisrate möglichst früh den 'Hands-on Level' ($25 \mu\text{Sv/h}$) unterschreitet und daß die anfängliche γ -Dosisrate nicht zu hoch ist. Ähnliche Anforderungen gelten auch für die Nachzerfallswärme.

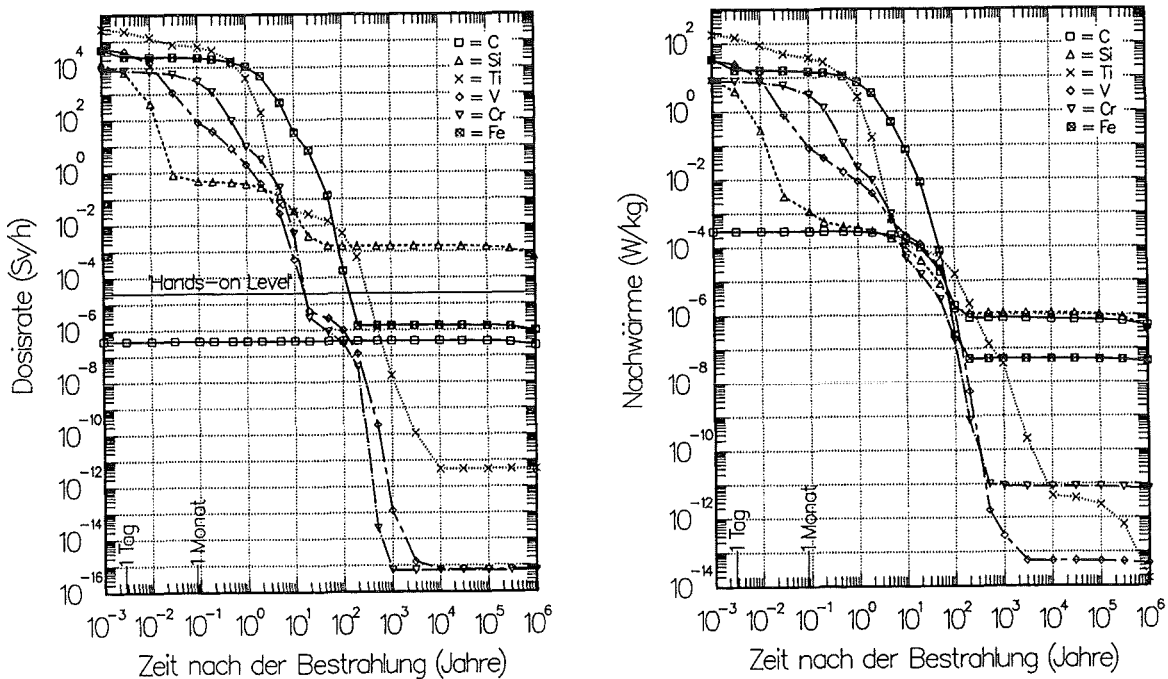


Abbildung 9. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für einige wichtige Elemente

In Abbildung 9 sind die Nachzerfallswärme und die γ -Dosisrate der wichtigsten Elemente für die Werkstoffauswahl dargestellt. Andere Elemente, die die radiologischen Kriterien auch ganz oder teilweise erfüllen, scheidern auf Grund ihrer mechanischen oder chemischen Eigenschaften aus. Vier der sechs dargestellten Elemente kommen als Basiselemente für die verschiedenen Werkstoffe in Frage. Dies sind Kohlenstoff (C), Titan (Ti), Vanadin (V) und Eisen (Fe). Silizium (Si) erfüllt die radiologischen Kriterien nur ungenügend, wird aber in Verbindung mit Kohlenstoff zur Herstellung von Keramiken verwendet (Siliziumkarbid SiC). Chrom besitzt zwar gute radiologische Eigenschaften, ist den übrigen Anforderungen jedoch nicht gewachsen. Es spielt aber eine wichtige Rolle als Legierungselement. Für die Rechnungen hier ebenso wie für die Legierungen in den folgenden Abschnitten wurden wieder dieselben Parameter verwendet wie sie zu Beginn des vierten Kapitels angegeben wurden. Als Neutronenspektrum wurde das Spektrum der ersten Wand genommen mit einer Belastung von 5 MW/m² während einer Dauer von 2,5 Jahren. Die Rechnungen wurden jeweils für ein Kilogramm des betreffenden Materials ausgeführt.

4.2.1.1 Titanlegierungen

Titanlegierungen sind aus der Luft- und Raumfahrt wohl bekannt. In diesem Einsatzbereich sind die Werkstoffe ebenfalls hohen Belastungen ausgesetzt. Während reines Titan wegen zu geringer Festigkeit keine Verwendung findet, halten die Legierungen hohen thermischen und mechanischen Belastungen stand. Sie sind außerdem sehr korrosions- und oxidationsbeständig (letzteres bis etwa 600 °C). Die hohe Festigkeit der Legierungen, ihr sehr gutes Streckgrenzenverhältnis und ihre geringe Dichte machen sie zu attraktiven Werkstoffen [47]. Auch die radiologischen Eigenschaften von reinem Titan sind vielversprechend. Zwar sind die Nachzerfallswärme und die γ -Dosisrate unmittelbar nach Ende der Bestrahlung sehr hoch, fallen aber nach einigen Jahren zu sehr niedrigen Werten ab (vgl. Abbildung 10 auf Seite 38). So unterschreitet die γ -Dosisrate nach rund 300 Jahren den Hands-on Level, und fällt weiter ab, bis sie nach 10 000 Jahren den sehr niedrigen Wert von $4,7 \cdot 10^{-12}$ Sv/h erreicht. Die Nachzerfallswärme unterschreitet bereits nach rund 10 Jahren die Grenze für niedrigaktiven Abfall (1 W/m³). Eine Eigenschaft allerdings, die Titan in einem anderen Bereich sehr attraktiv macht, ist im Bereich der Fusion eher unerwünscht. Gemeint ist seine Fähigkeit Wasserstoff zu speichern. Dazu kommt noch, daß durch die Neutronenbestrahlung große Mengen an Wasserstoff (ca. 4 000 appm) und Helium (ca. 1 000 appm) im Material gebildet werden. Große Mengen an Wasserstoff wirken sich negativ auf die Eigenschaften vieler Werkstoffe aus, so auch auf Titanlegierungen. Ein weiterer Schwachpunkt ist, daß Legierungselemente wie Aluminium (Al), Zinn (Sn) und Zirkon (Zr) sehr schlechte radiologische Eigenschaften besitzen.

In Abbildung 10 auf Seite 38 sind die Nachzerfallswärme und die γ -Dosisrate für drei verschiedene Legierungen aufgeführt. Während die hohen Anfangswerte von Isotopen bestimmt werden, die durch das Titan selbst gebildet werden (⁴⁸Sc, ⁴⁶Sc), werden die guten Langzeiteigenschaften des Titans von den schlechten Eigenschaften der Legierungselemente überdeckt (für die ersten beiden Legierungen ²⁶Al vom Aluminium, für die dritte Legierung ⁹²Nb vom Zirkon). Der Ersatz von Aluminium durch Zirkon bringt dabei zwar eine deutliche Verbesserung, aber zufriedenstellend ist das Ergebnis noch nicht. Als letztes sei noch erwähnt, daß man bisher nur sehr wenig darüber weiß, ob und wie sich die Eigenschaften von Titanlegierungen unter Bestrahlung ändern. Erste Untersuchungen ([48]) deuten auch hier auf Probleme hin. Auf Grund der Wasserstoffaffinität und der schlechten Eigenschaften der Legierungselemente scheidern Titanlegierungen wahrscheinlich als Strukturwerkstoffe für die erste Wand und das Blanket aus. In anderen Bereichen insbesondere dort wo nur wenig oder gar keine hochenergetischen Neutronen (> 13 MeV) hingelangen, können die TiAl-Legierungen an Attraktivität gewinnen, da dort kein ²⁶Al gebildet werden kann, denn die Schwelle der Reaktion ²⁷Al(n,2n)²⁶Al liegt eben bei 13 MeV.

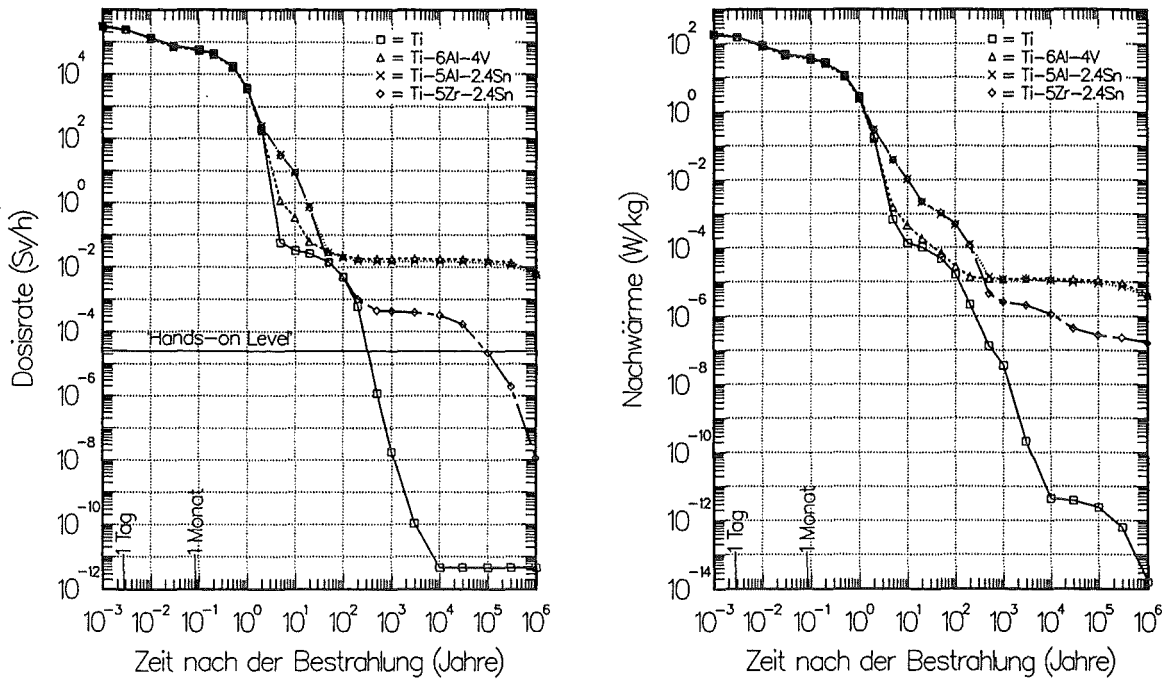


Abbildung 10. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für Titan und drei seiner Legierungen

4.2.1.2 Vanadinlegierungen

Erste Anstrengungen zur Entwicklung von Vanadinlegierungen wurden Mitte der 60er Jahre bis Anfang der 70er Jahre im Zusammenhang mit der Entwicklung des schnellen Brütters unternommen. Dabei wurde eine Vielzahl von verschiedenen Zusammensetzungen unter verschiedenen Gesichtspunkten untersucht [49]. Dazu zählten auch Untersuchungen zum Verhalten unter Neutronenbestrahlung, die aber mit Neutronen aus Kernspaltungsreaktoren oder mit leichten Ionen aus Beschleunigern durchgeführt wurden. Die Übertragung der Ergebnisse auf Fusionsbedingungen bereitet einige Probleme. Außerdem sind die Ergebnisse für eine Beurteilung unzureichend, was nicht zuletzt an der Vielzahl der möglichen Legierungen liegt [50]. Die Entwicklung wurde damals vor allem wegen schwerwiegender Korrosionsprobleme abgebrochen. Als Strukturmaterial für einen Fusionsreaktor kamen Vanadinlegierungen ins Gespräch als erste Aktivierungsrechnungen zeigten, daß Vanadin eine sehr niedrige Langzeitaktivität besitzt. Außerdem deuteten die früheren Untersuchungen darauf hin, daß sich die Vanadinlegierungen als Hochtemperaturwerkstoffe eignen. Dafür sprechen die hohe Wärmeleitfähigkeit und die hohe Zug- und Kriechfestigkeit bis 800 °C [50].

In Abbildung 11 auf Seite 39 sind die Nachzerfallswärme und die γ -Dosisrate für Vanadin und zwei seiner Legierungen dargestellt. Insbesondere die Legierung V-5Ti-5Cr zeigt nach hohen Anfangswerten einen frühen Abfall zu sehr niedrigen Langzeitwerten ähnlich wie bei reinem Vanadin. Im Gegensatz dazu werden die Langzeitwerte bei der Legierung V-3Ti-1Si durch den einprozentigen Siliziumanteil bestimmt, der zur Bildung von ²⁶Al führt. Ähnlich wie bei Titan und seinen Legierungen treten auch bei Vanadin Probleme auf, was das Verhalten gegenüber Wasserstoff angeht. Darüberhinaus gibt es Korrosionsprobleme durch Kohlenstoff, Stickstoff und Sauerstoff [51]. Schon relativ geringfügige Verunreinigungen dieser Elemente im Kühlmittel beispielsweise genügen, um die Festigkeit der Vanadinlegierungen drastisch zu verschlechtern. Deshalb wird der Einsatz von Vanadinlegierungen davon abhängen, ob es möglich ist das Material durch dünne keramische Schichten aus zum Beispiel Aluminiumnitrid (AlN) zu schützen. Ebenso wie bei Titan ist das Verhalten von Vanadin unter Bestrahlung noch zu wenig untersucht. Bei

zukünftigen Untersuchungen muß dabei ein besonderes Augenmerk auf dem Verhalten bei Bestrahlungen bis zu hohen Dosen liegen, insbesondere was das Volumenschwellen betrifft. Ein weiterer Nachteil ist, daß Vanadinlegierungen bisher in der Technik kaum Verwendung fanden. Herstellungs- und Verarbeitungsmethoden können zwar weitgehend von anderen Werkstoffen wie Titan und Aluminium oder Eisen abgeleitet werden, müssen aber doch erst noch getestet werden.

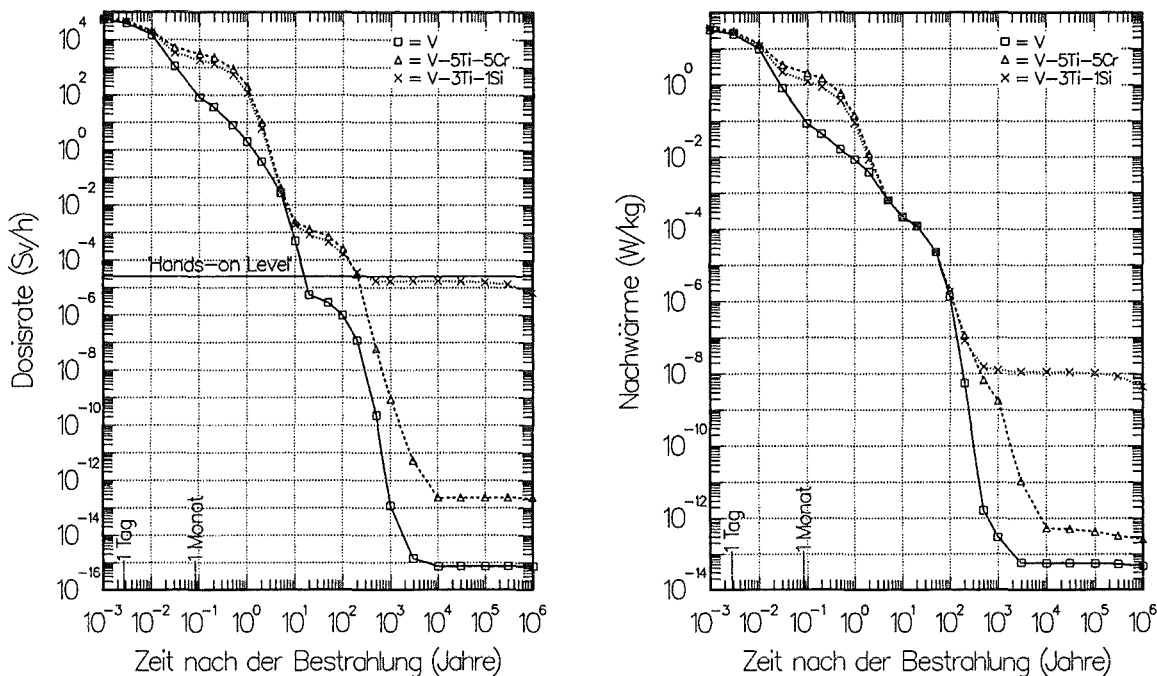


Abbildung 11. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für Vanadin und zwei seiner Legierungen

4.2.1.3 Stähle

Von den hier genannten Materialien sind die Stähle die vielfältigste, bekannteste und am besten untersuchte Gruppe von Werkstoffen. In der Diskussion befinden sich derzeit zwei Untergruppen dieses Werkstoffes: die aus dem Kernkraftwerksbau bekannten austenitischen Stähle und die ferritisch-martensitischen Stähle. Es war naheliegend mit einem austenitischen Stahl (zum Beispiel AISI 316 L) zunächst auf einen Werkstoff zurückzugreifen, der bereits in einem ähnlichen Umfeld eingesetzt wird nämlich beim Bau von Kernspaltungsreaktoren. Allerdings wußte man von Anfang an, daß die Anforderungen beim Bau eines Fusionsreaktors erheblich höher sein würden, sodaß nicht sicher war, ob die austenitischen Stähle diese Anforderungen erfüllen würden. Da aber die Entwicklung neuer Werkstoffe im allgemeinen sehr lange dauert - für die Kernspaltungsreaktoren etwa 20 Jahre - wurden erste Versuchsanlagen mit bekannten Materialien geplant und gebaut. Dabei zeigte sich, daß die austenitischen Stähle nicht die geforderten Eigenschaften mitbringen, weil sie den höheren Temperaturen beim Betrieb eines Fusionsreaktors sowie der andersgearteten Neutronenstrahlung nicht standhalten. Die bei der Fusion entstehenden Neutronen haben höhere Energien, was zu einer erheblich höheren Heliumproduktion im Material führt. Helium beeinflusst die Keimbildung und trägt damit wesentlich zur Hochtemperaturversprödung des Materials bei. Darüberhinaus beobachtet man ein erhebliches Volumenschwellen durch die Bildung von Leerstellen. Die dadurch entstehenden inneren Spannungen im Material führen zu dessen Überlastung. Da Eisen als reines Material aber ebenfalls die Anforderungen an einen niedrigaktivierbaren Werkstoff erfüllt (vgl. Abbildung 12 auf Seite 40), suchte man nach anderen hochwarm-

festen Stählen. Einige ferritisch-martensitische Stähle erfüllen die mechanischen und thermischen Anforderungen, vor allem die 9-12 % Chrom-Stähle mit der Werkstoffnummer 1.4914 nach DIN 17007. Ein solcher Stahl ist Manet II.

Wie Abbildung 12 zeigt, haben sowohl der austenitische Stahl AISI 316 L als auch der ferritisch-martensitische Stahl Manet II sehr hohe Langzeitwerte für die Nachzerfallswärme und die γ -Dosisrate. Der Grund dafür sind ihr Gehalt an Niob und Molybdän. Diese Elemente dienen der Härtung des Materials sowie der Stabilität der Korngrößen [52]. Bei dem Stahl OPTIFER I wurden Niob und Molybdän durch Tantal und Wolfram ersetzt, was zu einer deutlichen Reduktion von γ -Dosisrate und Nachzerfallswärme führt, ohne die anderen Eigenschaften zu verschlechtern. Optimal sind die Werte zwar noch immer nicht, aber hier wie bei vielen anderen Eigenschaften zeigt sich, daß Stähle zwar keine optimale Lösung bieten, daß sie jedoch soweit optimiert werden können, daß sie alle Anforderungen wenigstens ausreichend erfüllen. Deshalb scheinen insbesondere ferritisch-martensitische Stähle gute Kandidaten für einen Kompromiß zu sein.

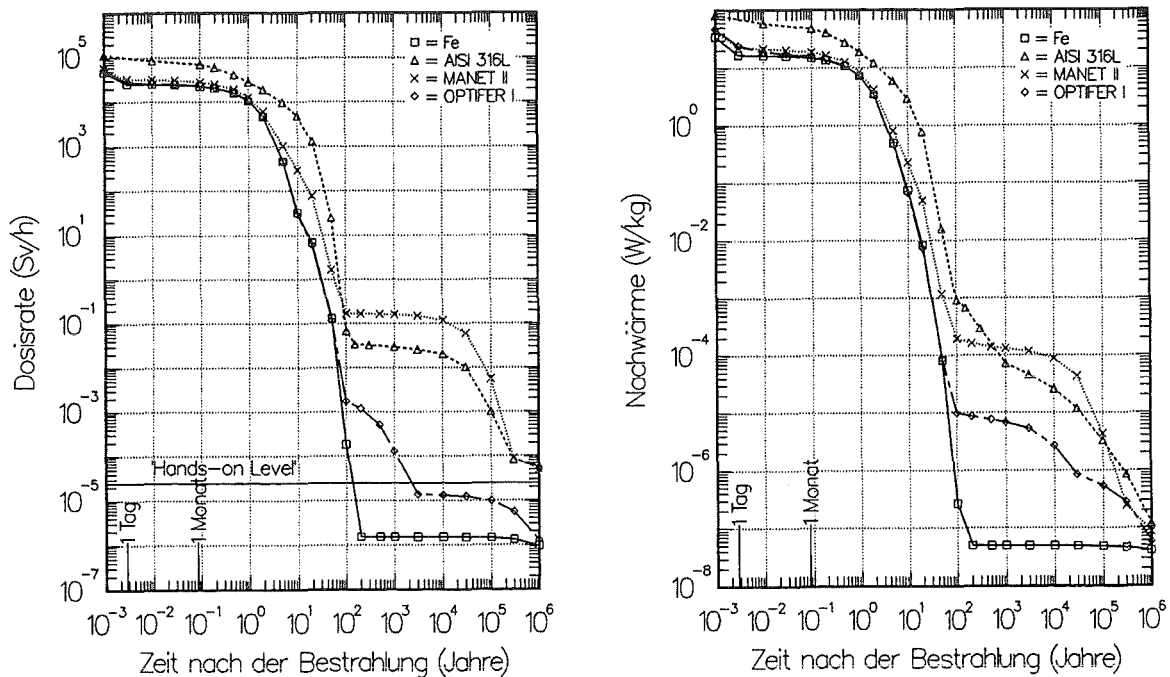


Abbildung 12. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für Eisen und drei seiner Legierungen

4.2.1.4 Keramiken

Keramik ist ein sehr alter und gleichzeitig neuer Werkstoff und das gleich in zweifacher Hinsicht sowohl in seiner Zusammensetzung als auch in seiner Herstellung. Altbekannt sind Keramiken auf der Basis von Tonerden d.h. Siliziumdioxid. Moderne Keramiken werden jedoch aus einer Vielzahl von Stoffen hergestellt wie zum Beispiel Siliziumkarbid (SiC) oder dünne Schutzschichten aus Aluminiumnitrid (AlN). Auch die Herstellungsverfahren haben sich zum Teil stark verändert. Moderne Keramiken werden heute in vielen Bereichen eingesetzt, wo sie meist hohen Temperaturen und/oder aggressiven chemischen Substanzen ausgesetzt sind. Mit am bekanntesten ist ihr Einsatz in der Luft- und Raumfahrtindustrie. Trotz des hohen Bekanntheitsgrades dieser Werkstoffklasse ist nur sehr wenig darüber bekannt, ob und wie sich Keramikteile untereinander oder mit anderen Materialien verbinden lassen. Einheitliches Keramikmaterial hat den Nachteil, daß es sehr spröde ist und die Festigkeit relativ großen Schwankungen unterliegt. Um diese Eigenschaften zu verbessern, wird das einheitliche Keramikmaterial mit Keramikfasern

verstärkt. Für den Einsatz in einem Fusionsreaktor wird zur Zeit ein mit Siliziumkarbidfasern verstärktes Siliziumkarbidverbundmaterial (SiC_f/SiC) favorisiert. Bei einer Verwendung als Material für die erste Wand besitzt es zusätzlich den Vorteil, daß die durch das Plasma herausgeschlagenen Atome zu einem geringeren Energieverlust im Plasma führen als bei schwereren Materialien. Wie bei den Titan- und Vanadinlegierungen ist jedoch das Verhalten der faserverstärkten Verbundmaterialien unter Neutronenbestrahlung weitgehend unbekannt. Ein Problem könnte die hohe Porosität sein (10-15 Vol-%). Bei neuem Material geht man davon aus, daß die Poren geschlossen sind. Sollten sich die Poren aber unter der mechanischen, thermischen oder Strahlenbelastung öffnen, wäre ein Gasaustausch zwischen Plasma und Blanket möglich [53].

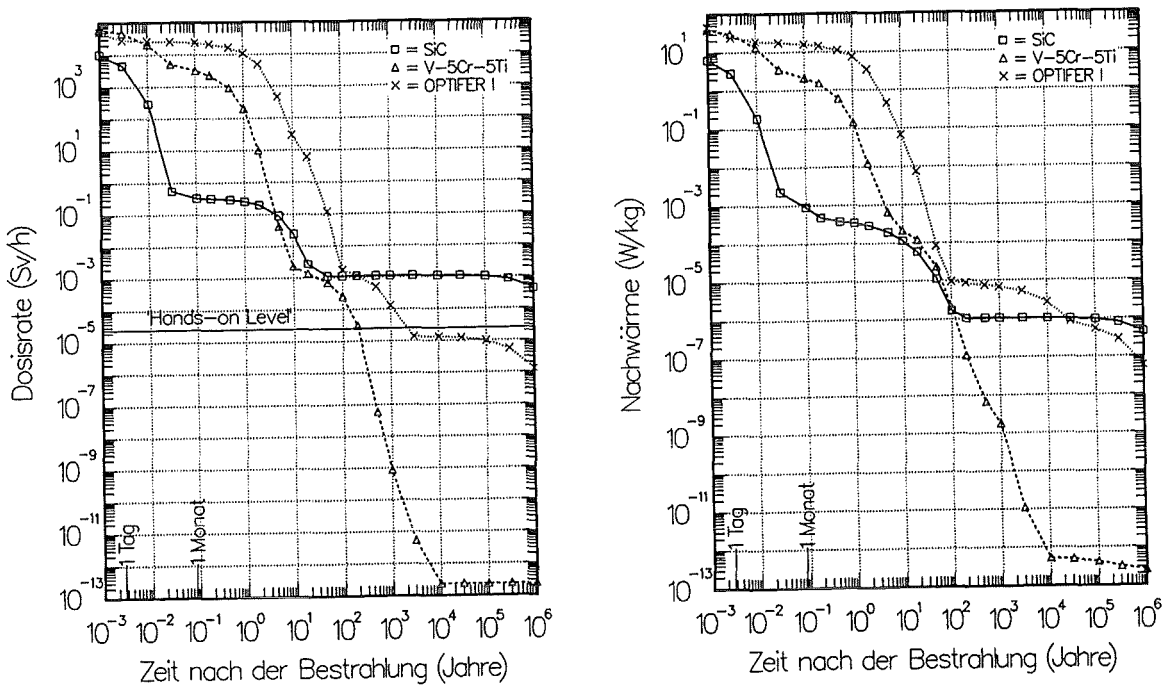
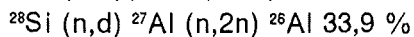
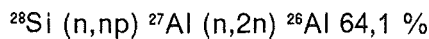


Abbildung 13. Nachzerfallswärme und γ -Dosisrate für Siliziumkarbid, OPTIFER I und eine Vanadinlegierung

Das Aktivierungsverhalten von Siliziumkarbid ist zwiespältig (vgl. Abbildung 13). Die Anfangswerte direkt nach dem Abschalten sind fast so hoch wie die der Vanadinlegierungen, klingen aber schneller ab, während die Langzeitwerte durch das Silizium über sehr lange Zeit hoch sind. Ursache dafür ist die Bildung von ²⁶Al durch die beiden Reaktionsketten:



Wie schon bei den Titanlegierungen bemerkt, hat der zweite Reaktionsschritt eine Schwelle von 13 MeV. Jedoch denkt man gerade bei den Keramiken an einen Einsatz als Material für die erste Wand, also einen Bereich, wo ein erheblicher Anteil der Neutronen eine höhere Energie hat. Außerdem werden große Mengen an Wasserstoff und Helium durch die Bestrahlung erzeugt. Die Produktion von Tritium ist nur um einen Faktor 0,5 kleiner als bei Vanadin und die Heliumproduktion ist die höchste (mehr als eine Größenordnung) von allen hier behandelten Werkstoffen. Ein weiterer Nachteil ist, daß sich die keramischen Werkstoffe im Gegensatz zu den metallischen Werkstoffen noch nicht wiederverwenden lassen.

4.2.2 Entwicklung neuer Legierungen

In den vorhergehenden Abschnitten wurden eine Reihe von Werkstoffen angesprochen. Dabei wurde auch darauf hingewiesen, daß es sich bei vielen davon um neuentwickelte Werkstoffe handelt. Wie kommt man nun zu neuen Materialien? Zwei Wege bieten sich an, entweder indem man von einem bereits existierenden Material ausgeht und versucht durch Substitution einzelner Bestandteile die Eigenschaften zu verbessern, oder indem man ein geeignetes Grundmaterial wählt und durch Hinzufügen einer möglichst geringen Anzahl weiterer Komponenten die Materialeigenschaften optimiert. Beide Wege setzen ein hohes Maß an Erfahrung im Umgang mit Werkstoffen voraus. Die beiden Verfahrensweisen sollen am Beispiel der Vanadinlegierungen und am Beispiel der ferritisch-martensitischen Stähle erläutert werden.

Die Vanadinlegierungen sind ein Beispiel für die Wahl eines neuen Grundmaterials mit anschließender Optimierung. Vanadin wurde in die Diskussion aufgenommen wegen seiner Hochtemperatureigenschaften und seiner geringen Langzeitaktivität. Reines Vanadin besitzt jedoch keine ausreichende Zugfestigkeit und korrodiert sehr schnell. Um die Zugfestigkeit zu erhöhen und damit die Verarbeitung zu erleichtern wird Titan hinzugefügt, während Chrom dazu dient die Korrosion zu verringern. Als Ergebnis kommt man zu einer Legierung mit der Zusammensetzung Vanadin 90 %, Titan 5 %, Chrom 5 % oder ähnlicher Zusammensetzung. Ein besonders hochwarmfester Werkstoff wird durch die Zugabe von Silizium erzielt. Damit erhält man folgende Zusammensetzung: Vanadin 96 %, Titan 3 %, Silizium 1 %. Die beste Zusammensetzung muß durch Erschmelzen und Testen der Legierungen herausgefunden werden. Trotz großer Anstrengungen scheint es aber nicht zu gelingen, die Korrosion von Vanadin durch Legieren zu unterdrücken. Es wird vielmehr auch weiterhin notwendig sein, Bauteile aus Vanadinlegierungen durch zusätzliche Schutzmaßnahmen wie dünne keramische Schichten gegen Korrosion zu schützen. Dabei ist darauf zu achten, daß die niedrigen Werte für die Langzeitaktivität nicht verloren gehen. Die Legierung V-3Ti-1Si zeigt, daß die Zugabe eines Legierungselementes zwiespältig sein kann. Zwar wird durch das Silizium die Festigkeit weiter erhöht, dafür aber die Langzeitaktivität drastisch heraufgesetzt (vgl. Abbildung 11 auf Seite 39). Hier überwiegt der Nachteil den Vorteil.

Der zweite Weg wurde bei der Entwicklung neuer ferritisch-martensitischer Stähle eingeschlagen. Als Ausgangspunkt wurden Stähle benutzt, die der Werkstoffnummer 1.4914 nach DIN 17007 entsprechen. Dabei handelt es sich um hochlegierte Stähle mit 10-12 % Chromanteil als wichtigstem Legierungselement. Insbesondere ist hier der Stahl Manet II zu nennen [54] (Manet = MARTensitic steel for NET). Dieser Stahl wurde zunächst für NET (Next European Torus) entwickelt. Inzwischen ist NET in ITER aufgegangen und die Entwicklung wird jetzt in diesem Rahmen fortgeführt. Der Stahl Manet II erfüllt die meisten an einen Strukturwerkstoff gestellten Forderungen. Tabelle 12 auf Seite 43 enthält die Zusammensetzung dieses Stahls. Unbefriedigend ist jedoch die hohe Langzeitaktivität (vgl. Abbildung 12 auf Seite 40). Ursache dafür sind die Legierungselemente Nickel, Niob und Molybdän. Sie dienen zur Festigkeitserhöhung und zur Ausbildung einer möglichst feinkörnigen Struktur. Ausgehend von diesen Elementen werden durch die Neutronenbestrahlung verhältnismäßig große Mengen langlebiger, radioaktiver Isotope gebildet (s. Tabelle 13 auf Seite 44, sowie Tabelle 14 auf Seite 45). Ziel der Weiterentwicklung muß es demnach sein die drei genannten Elemente durch andere zu ersetzen, ohne daß dabei die übrigen guten Eigenschaften dieses Stahls verlorengehen. Ein erster Schritt in diese Richtung war die Legierung CeTa, bei der die Elemente Nickel, Niob und Molybdän durch Tantal und Wolfram ersetzt wurden [55] (vgl. Tabelle 12 auf Seite 43). Eine weiter optimierte Zusammensetzung besitzt der Stahl OPTIFER I (Tabelle 12 auf Seite 43). Die beiden zuletzt genannten Legierungen wurden vom Institut für Materialforschung I des Forschungszentrums Karlsruhe in Zusammenarbeit mit der SAARSTAHL GmbH erstellt.

Element	Manet II	CeTa	OPTIFER I
Fe	Basis	Basis	Basis
B	0,008	0,008	0,006
C	0,11	0,17	0,12
N	0,035	0,015	0,03
Si	0,2	0,07	0,04
V	0,2	0,59	0,25
Cr	10,4	9,6	9,5
Mn	1,13	1,35	0,6
Ni	0,6	-	-
Zr	0,025	-	-
Nb	0,15	-	-
Mo	0,58	-	-
Ta	-	0,48	0,08
W	-	0,81	1,0

Tabelle 12. Zusammensetzung der drei Legierungen Manet II, CeTa und OPTIFER I: Die Angaben sind in Gewichtsprozent und wurden folgenden Referenzen entnommen: [54] Tabelle 1 Seite 22 für Manet II, [55] Tabelle 1 Seite 19 für CeTa und [56] für OPTIFER I.

Erste Untersuchungen zeigen, daß durch die Ersetzung die Eigenschaften von OPTIFER I mindestens so gut sind wie die von Manet II [52]. Tabelle 13 auf Seite 44 zeigt die Nachzerfallswärme und Tabelle 14 auf Seite 45 die γ -Dosisrate für reines Eisen und die Legierungen Manet II und OPTIFER I. Die selben Werte sind in Abbildung 12 auf Seite 40 dargestellt. Außerdem sind in den Tabellen jeweils die Radioisotope angegeben, die mindestens 10 % der Nachzerfallswärme oder der γ -Dosisrate produzieren. Ein Vergleich der Angaben ergibt, daß die Anfangswerte für die beiden Größen bis etwa 100 Jahre in erster Linie durch das Eisen selbst bestimmt sind. Das bedeutet, daß sich an diesen Werten durch eine Änderung der Zusammensetzung keine wesentlichen Verbesserungen erzielen lassen, solange man bei Eisen als Basiselement bleibt. Anders ist die Situation bei den Langzeitwerten ab etwa 100 Jahren. Hier liegen die Werte von Eisen deutlich unter denen der Legierungen und die angegebenen Radioisotope stammen nicht von Kernreaktionen an Eisen sondern von solchen an den Legierungselementen. So wird die Nachzerfallswärme von Eisen ab 200 Jahren nach Ende der Bestrahlung allein von Mangan-53 beherrscht. Dieses Isotop entsteht durch die (n,np)-Reaktion an Eisen-54. Demgegenüber wird die um drei Größenordnungen höhere Nachzerfallswärme von Manet II ab dieser Zeit vorwiegend durch Niob-94 produziert. Niob-94 entsteht durch die (n, γ)-Reaktion aus Niob-93. Das wichtigste Isotop für die Nachzerfallswärme von OPTIFER I ab dieser Zeit ist Kohlenstoff-14. Er entsteht durch (n,p)-Reaktionen aus Stickstoff-14. Immerhin wird durch die Ersetzung von Niob durch Tantal die Nachzerfallswärme um rund einen Faktor 20 erniedrigt. Wollte man diesen Wert weiter erniedrigen müßte zunächst der Stickstoffgehalt von 0,03 Gew.-% reduziert werden, was jedoch aus anderen Gründen nicht ohne weiteres möglich ist.

In Tabelle 14 auf Seite 45 wird für die γ -Dosisrate der beiden Legierungen eine ähnliche Situation sichtbar, wenn auch mit zum Teil anderen Isotopen. So wird die Langzeitdosisrate von Eisen durch den Zerfall von Eisen-60 in Kobalt-60 und dessen Zerfall in Nickel-60 dominiert, Für Manet II ist wieder das Isotop Niob-94 bestimmend, während die Langzeitdosisrate von OPTIFER I zunächst von Iridium 192 und später von Rhenium-186 beherrscht wird. Eisen-60 entsteht durch zwei aufeinanderfolgende Neutroneneinfänge ((n, γ)-Reaktionen) aus Eisen-58, während Rhenium-186 und Iridium-192 in mehreren Schritten aus Wolfram-186 entstehen. Wolfram ersetzt das Molybdän. Man würde sich jedoch einen besseren Ersatz wünschen. Leider dürfte der schwer zu finden sein, da es praktisch keine anderen Elemente mit gleicher Funktion für die Legierungen gibt. Will man trotzdem die Dosisrate weiter erniedrigen bleibt nur eine allerdings sehr teure Möglichkeit. Dazu muß das Isotop Wolfram-186 abgetrennt werden. Dieses Isotop macht aber 28,6 % des natürlich vorkommenden Wolframs aus.

Nachzerfallswärme [W/kg]						
Zeit [Jahre]	0	0,001	0,003	0,01	0,03	0,1
Fe	2,09*10 ² ⁵⁶ Mn 90,5	3,46*10 ¹ ⁵⁶ Mn 51,8 ⁵⁴ Mn 42,8	1,68*10 ¹ ⁵⁴ Mn 88,1	1,65*10 ¹ ⁵⁴ Mn 89,3	1,60*10 ¹ ⁵⁴ Mn 90,1	1,49*10 ¹ ⁵⁴ Mn 91,5
Manet II	2,60*10 ² ⁵⁶ Mn 81,5	4,31*10 ¹ ⁵⁶ Mn 46,6 ⁵⁴ Mn 38,4	2,27*10 ¹ ⁵⁴ Mn 72,8	2,16*10 ¹ ⁵⁴ Mn 76,1	2,05*10 ¹ ⁵⁴ Mn 78,7	1,86*10 ¹ ⁵⁴ Mn 82,2
OPTIFER I	2,47*10 ² ⁵⁶ Mn 78,0	4,70*10 ¹ ⁵⁶ Mn 38,8 ⁵⁴ Mn 32,0 ¹⁸⁸ Re 12,4	2,43*10 ¹ ⁵⁴ Mn 61,7 ¹⁸⁸ Re 11,7	1,92*10 ¹ ⁵⁴ Mn 77,8	1,75*10 ¹ ⁵⁴ Mn 83,8	1,58*10 ¹ ⁵⁴ Mn 87,9
Zeit [Jahre]	0,2	0,5	1,0	2,0	5,0	10
Fe	1,36*10 ¹ ⁵⁴ Mn 92,4	1,06*10 ¹ ⁵⁴ Mn 93,0	7,21 ⁵⁴ Mn 91,5	3,41 ⁵⁴ Mn 86,1 ⁵⁵ Fe 12,7	4,87*10 ⁻¹ ⁵⁴ Mn 53,0 ⁵⁵ Fe 41,1	7,49*10 ⁻² ⁵⁵ Fe 74,0 ⁶⁰ Co 20,0
Manet II	1,66*10 ¹ ⁵⁴ Mn 85,0	1,26*10 ¹ ⁵⁴ Mn 87,6	8,52 ⁵⁴ Mn 86,4	4,17 ⁵⁴ Mn 78,6 ⁶⁰ Co 11,7	7,93*10 ⁻¹ ⁶⁰ Co 41,5 ⁵⁴ Mn 36,3 ⁵⁵ Fe 21,9	2,24*10 ⁻¹ ⁶⁰ Co 76,0 ⁵⁵ Fe 21,4
OPTIFER I	1,42*10 ¹ ⁵⁴ Mn 90,2	1,09*10 ¹ ⁵⁴ Mn 92,4	7,28 ⁵⁴ Mn 92,0	3,40 ⁵⁴ Mn 87,5 ⁵⁵ Fe 11,2	4,64*10 ⁻¹ ⁵⁴ Mn 56,4 ⁵⁵ Fe 38,0	6,68*10 ⁻² ⁵⁵ Fe 73,3 ⁶⁰ Co 19,8
Zeit [Jahre]	20	50	100	200	500	1 000
Fe	8,28*10 ⁻³ ⁵⁵ Fe 51,3 ⁶⁰ Co 48,6	8,14*10 ⁻⁵ ⁶⁰ Co 95,4	2,64*10 ⁻⁷ ⁶⁰ Co 41,2 ³ H 40,2 ⁵³ Mn 18,4	5,01*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 96,8	4,96*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 97,8	4,96*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 97,8
Manet II	4,99*10 ⁻² ⁶⁰ Co 91,6	1,17*10 ⁻³ ⁶⁰ Co 75,6 ⁹⁴ Nb 10,1	1,94*10 ⁻⁴ ⁹⁴ Nb 60,5 ⁶³ Ni 19,8	1,61*10 ⁻⁴ ⁹⁴ Nb 72,8 ⁶³ Ni 12,0	1,38*10 ⁻⁴ ⁹⁴ Nb 83,6	1,30*10 ⁻⁴ ⁹⁴ Nb 87,5
OPTIFER I	7,34*10 ⁻³ ⁵⁵ Fe 51,2 ⁶⁰ Co 48,4	8,40*10 ⁻⁵ ⁶⁰ Co 81,6	9,54*10 ⁻⁶ ¹⁴ C 68,1 ¹⁹² Ir 17,5	8,62*10 ⁻⁶ ¹⁴ C 74,5 ¹⁹² Ir 14,5	7,54*10 ⁻⁶ ¹⁴ C 82,0	6,71*10 ⁻⁶ ¹⁴ C 86,8

Nachzerfallswärme [W/kg]						
Zeit [Jahre]	3 000	10 000	30 000	100 000	300 000	1 000 000
Fe	4,96*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 97,8	4,95*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 97,8	4,93*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 97,8	4,86*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 98,0	4,67*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 98,2	4,08*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 98,6
Manet II	1,16*10 ⁻⁴ ⁹⁴ Nb 91,9	8,74*10 ⁻⁵ ⁹⁴ Nb 95,8	4,31*10 ⁻⁵ ⁹⁴ Nb 98,2	4,32*10 ⁻⁶ ⁹⁴ Nb 89,8	2,11*10 ⁻⁷ ⁹⁹ Tc 63,9 ⁵³ Mn 18,9	6,86*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 50,9 ⁹⁹ Tc 20,1 ⁹² Nb 17,0
OPTIFER I	5,30*10 ⁻⁶ ¹⁴ C 86,2 ¹⁸⁶ Re 11,0	2,68*10 ⁻⁶ ¹⁴ C 73,3 ¹⁸⁶ Re 21,4	8,43*10 ⁻⁷ ¹⁸⁶ Re 63,2 ¹⁴ C 20,7	5,33*10 ⁻⁷ ¹⁸⁶ Re 78,5	2,86*10 ⁻⁷ ¹⁸⁶ Re 74,1 ⁵³ Mn 14,3	5,86*10 ⁻⁸ ⁵³ Mn 60,7 ¹⁸⁶ Re 31,6

Tabelle 13. Nachzerfallswärme für reines Eisen und die Legierungen Manet II und OPTIFER I: Die Zeit ist angegeben in Jahren nach Ende der Bestrahlung, die Nachzerfallswärme in W/kg darunter die wichtigsten Radionuklide mit ihrem prozentualen Anteil.

γ-Dosisrate [Sv/h]						
Zeit [Jahre]	0	0,001	0,003	0,01	0,03	0,1
Fe	2,54*10 ⁵ ⁵⁶ Mn 89,6	4,70*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 50,3 ⁵⁶ Mn 46,0	2,55*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 92,6	2,50*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 93,7	2,44*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 94,6	2,27*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 96,1
Manet II	3,12*10 ⁵ ⁵⁶ Mn 82,0	5,78*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 45,8 ⁵⁶ Mn 41,9	3,33*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 79,3	3,22*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 81,6	3,09*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 83,5	2,82*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 86,6
OPTIFER I	2,82*10 ⁵ ⁵⁶ Mn 82,4	5,21*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 46,1 ⁵⁶ Mn 42,2	2,88*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 83,4	2,65*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 89,9	2,54*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 92,4	2,34*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 94,8
Zeit [Jahre]	0,2	0,5	1,0	2,0	5,0	10
Fe	2,07*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 97,3	1,60*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 98,8	1,06*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 99,1	4,75*10 ³ ⁵⁴ Mn 98,5	4,61*10 ² ⁵⁴ Mn 89,4 ⁶⁰ Co 10,6	3,25*10 ¹ ⁶⁰ Co 78,0 ⁵⁴ Mn 22,0
Manet II	2,52*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 89,2	1,92*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 92,2	1,28*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 91,9	6,08*10 ³ ⁵⁴ Mn 86,2 ⁶⁰ Co 13,6	1,02*10 ³ ⁶⁰ Co 54,7 ⁵⁴ Mn 45,2	2,97*10 ² ⁶⁰ Co 97,2
OPTIFER I	2,12*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 96,6	1,63*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 98,5	1,08*10 ⁴ ⁵⁴ Mn 99,0	4,82*10 ³ ⁵⁴ Mn 98,6	4,62*10 ² ⁵⁴ Mn 90,6	2,97*10 ¹ ⁶⁰ Co 75,5 ⁵⁴ Mn 24,5
Zeit [Jahre]	20	50	100	200	500	1 000
Fe	6,80 ⁶⁰ Co 100,0	1,31*10 ⁻¹ ⁶⁰ Co 100,0	1,84*10 ⁻⁴ ⁶⁰ Co 100,0	1,52*10 ⁻⁶ ⁶⁰ Fe/ ⁶⁰ Co 100,0	1,52*10 ⁻⁶ ⁶⁰ Fe/ ⁶⁰ Co 100,0	1,51*10 ⁻⁶ ⁶⁰ Fe/ ⁶⁰ Co 100,0
Manet II	7,76*10 ¹ ⁶⁰ Co 99,8	1,66 ⁶⁰ Co 89,8	1,70*10 ⁻¹ ⁹⁴ Nb 97,5	1,67*10 ⁻¹ ⁹⁴ Nb 99,0	1,65*10 ⁻¹ ⁹⁴ Nb 99,3	1,61*10 ⁻¹ ⁹⁴ Nb 99,6
OPTIFER I	6,01 ⁶⁰ Co 99,9	1,18*10 ⁻¹ ⁶⁰ Co 98,4	1,74*10 ⁻³ ¹⁹² Ir 82,9	1,18*10 ⁻³ ¹⁹² Ir 91,8	5,03*10 ⁻⁴ ¹⁹² Ir 90,8	1,29*10 ⁻⁴ ¹⁹² Ir 84,5

γ -Dosisrate [Sv/h]						
Zeit [Jahre]	3 000	10 000	30 000	100 000	300 000	1 000 000
Fe	$1,51 \cdot 10^{-6}$ $^{60}\text{Fe}/^{60}\text{Co}$ 100,0	$1,51 \cdot 10^{-6}$ $^{60}\text{Fe}/^{60}\text{Co}$ 100,0	$1,49 \cdot 10^{-6}$ $^{60}\text{Fe}/^{60}\text{Co}$ 100,0	$1,45 \cdot 10^{-6}$ $^{60}\text{Fe}/^{60}\text{Co}$ 100,0	$1,32 \cdot 10^{-6}$ $^{60}\text{Fe}/^{60}\text{Co}$ 100,0	$9,55 \cdot 10^{-7}$ $^{60}\text{Fe}/^{60}\text{Co}$ 100,0
Manet II	$1,50 \cdot 10^{-1}$ ^{94}Nb 99,9	$1,18 \cdot 10^{-1}$ ^{94}Nb 99,9	$5,98 \cdot 10^{-2}$ ^{94}Nb 99,8	$5,57 \cdot 10^{-3}$ ^{94}Nb 98,2	$3,12 \cdot 10^{-5}$ ^{92}Nb 55,5 ^{94}Nb 19,0 ^{99}Tc 16,6	$2,38 \cdot 10^{-5}$ ^{92}Nb 72,0 ^{99}Tc 19,5
OPTIFER I	$1,37 \cdot 10^{-5}$ ^{186}Re 87,1	$1,30 \cdot 10^{-5}$ ^{186}Re 89,3 ^{60}Co 10,3	$1,22 \cdot 10^{-5}$ ^{186}Re 88,7 ^{60}Co 10,8	$9,86 \cdot 10^{-6}$ ^{186}Re 86,4 ^{60}Co 13,0	$5,49 \cdot 10^{-6}$ ^{186}Re 77,6 ^{60}Co 21,3	$1,28 \cdot 10^{-6}$ ^{60}Co 69,2 ^{186}Re 26,1

Tabelle 14. γ -Dosisrate für reines Eisen und die Legierungen Manet II und OPTIFER I: Die Zeit ist angegeben in Jahren nach Ende der Bestrahlung, die γ -Dosisrate in Sv/h darunter die wichtigsten Radionuklide mit ihrem prozentualen Anteil.

4.2.3 Die Bedeutung von Verunreinigungen

Bis hierher wurden die Materialien so behandelt, als ob sie absolut rein wären. In Wirklichkeit hat man es jedoch in jedem Material mit einer großen Anzahl von Verunreinigungen zu tun. Die Frage ist welche Bedeutung haben die Verunreinigungen für die radiologischen Eigenschaften eines Materials. Einen ersten Hinweis darauf mag die Tatsache geben, daß Nachweismethoden, die auf der Aktivierung von Material mit Hilfe von Neutronen oder geladenen Teilchen beruhen, zu den empfindlichsten Untersuchungsmethoden gehören. Sie sind um Größenordnungen empfindlicher als chemische Verfahren. Deshalb ist damit zu rechnen, daß bereits sehr niedrige Konzentrationen genügen um die radiologischen Eigenschaften zu beeinflussen. Einen wesentlich besseren Einblick erhält man, wenn man die γ -Dosisrate der verschiedenen Elemente zu einem bestimmten Zeitpunkt miteinander vergleicht. Da wir uns in erster Linie für das Langzeitverhalten interessieren, ist der Zeitpunkt von 200 Jahren nach Ende der Bestrahlung von besonderem Interesse, da die γ -Dosisrate von Eisen dann den Hands-on Level unterschritten hat und für lange Zeit stabil bleibt. Ein weiterer Zeitpunkt ist vielleicht ebenfalls interessant. 10 000 Jahre nach Ende der Bestrahlung erreicht die γ -Dosisrate von Vanadin ihren niedrigsten Wert. Tabelle 15 auf Seite 47 zeigt die γ -Dosisraten für alle stabilen Elemente zu den beiden eben genannten Zeitpunkten. Beim Vergleich der Werte stellt man fest, daß sie über einen weiten Bereich streuen. Bei 200 Jahren hat Arsen die niedrigste γ -Dosisrate ($4,27 \cdot 10^{-11}$ Sv/h). Sein Wert ist um 13 Größenordnungen kleiner als der von Silber ($3,63 \cdot 10^2$ Sv/h). Der Wert von Eisen liegt mit $1,52 \cdot 10^{-6}$ etwas unterhalb der Mitte zwischen diesen beiden Extremen. Wichtiger ist daß er unterhalb des Hands-on Levels liegt. Will man nun wissen wie hoch die Konzentration eines Elementes sein darf, ohne daß es die Aktivierbarkeit des Materials negativ beeinflußt, so kann man die γ -Dosisrate des Materials durch die γ -Dosisrate des Elementes zum gleichen Zeitpunkt dividieren, da sich die γ -Dosisrate immer auf ein Kilogramm Material bezieht. Das Ergebnis ist der höchstzulässige Gewichtsanteil, den das Element im Material annehmen darf. Das Verfahren ist nicht ganz exakt, da die Absorption von γ -Strahlung elementabhängig ist. Der Fehler, den man dabei macht, ist jedoch kleiner als ein Faktor 3. So darf die Konzentration von Kobalt in Eisen einen Wert von $120 \text{ ppm} = (1,52 \cdot 10^{-6}) / (1,28 \cdot 10^{-2}) \cdot 10^6 \text{ ppm}$ nicht übersteigen, wenn die γ -Dosisrate von Eisen nicht wesentlich unterschritten werden soll. Hat man es mit mehreren Verunreinigungen zu tun, so muß berücksichtigt werden, daß sich die Effekte der verschiedenen Verunreinigungen aufsummieren, wodurch sich die erlaubte Höchstkonzentration weiter verringert. Bei den Eisen-

basislegierungen ist es das Ziel nach Möglichkeit die Werte von Eisen zu halten. Von den 81 stabilen Elementen des Periodensystems zeigen aber nur 18 nach 200 Jahren Abklingzeit eine geringere γ -Dosisrate als Eisen. Dazu gehören Vanadin, Chrom, Mangan sowie Kohlenstoff, die deshalb ohne Begrenzung zugesetzt werden dürfen. Auch Stickstoff zeigt eine geringere γ -Dosisrate als Eisen, hat jedoch eine sehr hohe Nachzerfallswärme. Alle übrigen in Tabelle 12 auf Seite 43 angegebenen Elemente dürfen unter radiologischen Gesichtspunkten nicht in beliebig großen Mengen vorhanden sein. Das gilt leider auch für den Molybdänersatz Wolfram, dessen Höchstkonzentration mit etwa 25 ppm weit unter dem Wert liegt, der aus metallurgischen Gründen notwendig ist (etwa 1 % = 10 000 ppm). Wolfram ist aber immer noch besser als Molybdän, dessen γ -Dosisrate um mehr als eine Größenordnung höher liegt als die von Wolfram. Anders dagegen ist die Situation bei dem Niobersatz Tantal. Hier liegt die radiologisch zulässige Konzentration knapp über der metallurgisch notwendigen. Mit Tantal hat man nicht nur metallurgisch und radiologisch einen Ersatz gefunden, sondern mit Niob auch eines der radiologisch kritischsten Elemente als Legierungselement eliminiert.

Als besonders kritisch müssen diejenigen Elemente angesehen werden, deren zulässige Konzentration unterhalb 10 ppm beziehungsweise deren γ -Dosisrate über 0,15 Sv/h liegt. Es sind dies Aluminium, Argon und Kalium, Niob und Molybdän, Palladium, Silber und Cadmium, Xenon, Cäsium und Barium, die Elemente von Samarium bis Platin mit Ausnahme von Tantal, sowie Wismut. Abgesehen von den Edelgasen Argon und Xenon dürfte es nicht ganz einfach sein, derart niedrige Werte zu erreichen. Allein schon für den Nachweis so geringer Mengen ist ein erheblicher Aufwand erforderlich. Nur massenspektrografische Untersuchungen sind dazu in der Lage.

γ -Dosisrate [Sv/h]					
Element	200 a	10 000 a	Element	200 a	10 000 a
H	-	-	Mo	$9,32 \cdot 10^{-1}$	$5,32 \cdot 10^{-1}$
He	-	-	Ru	$1,05 \cdot 10^{-2}$	$9,63 \cdot 10^{-3}$
Li	$5,32 \cdot 10^{-15}$	$5,30 \cdot 10^{-15}$	Rh	$6,25 \cdot 10^{-5}$	$1,22 \cdot 10^{-6}$
Be	$5,91 \cdot 10^{-7}$	$5,89 \cdot 10^{-7}$	Pd	8,47	$8,86 \cdot 10^{-7}$
B	$3,86 \cdot 10^{-6}$	$3,84 \cdot 10^{-6}$	Ag	$3,63 \cdot 10^2$	$3,18 \cdot 10^{-5}$
C	$3,84 \cdot 10^{-7}$	$3,83 \cdot 10^{-7}$	Cd	$7,81 \cdot 10^{-1}$	$6,83 \cdot 10^{-8}$
N	$9,62 \cdot 10^{-8}$	$9,58 \cdot 10^{-8}$	In	$3,13 \cdot 10^{-5}$	$2,73 \cdot 10^{-12}$
O	$7,33 \cdot 10^{-8}$	$7,29 \cdot 10^{-8}$	Sn	$6,90 \cdot 10^{-4}$	$5,73 \cdot 10^{-4}$
F	$9,38 \cdot 10^{-11}$	$9,34 \cdot 10^{-11}$	Sb	$3,04 \cdot 10^{-8}$	$9,52 \cdot 10^{-9}$
Ne	$9,76 \cdot 10^{-10}$	$9,67 \cdot 10^{-10}$	Te	$3,45 \cdot 10^{-4}$	$3,23 \cdot 10^{-4}$
Na	$1,19 \cdot 10^{-4}$	$1,18 \cdot 10^{-4}$	I	$3,21 \cdot 10^{-7}$	$1,01 \cdot 10^{-7}$
Mg	$7,28 \cdot 10^{-5}$	$7,22 \cdot 10^{-5}$	Xe	$2,92 \cdot 10^{-1}$	$6,99 \cdot 10^{-15}$
Al	$2,90 \cdot 10^{-1}$	$2,88 \cdot 10^{-1}$	Cs	$2,10 \cdot 10^{-1}$	$3,57 \cdot 10^{-13}$
Si	$1,60 \cdot 10^{-3}$	$1,59 \cdot 10^{-3}$	Ba	$1,01 \cdot 10^{-1}$	$6,23 \cdot 10^{-9}$
P	$1,24 \cdot 10^{-4}$	$4,04 \cdot 10^{-5}$	La	$6,39 \cdot 10^{-4}$	$1,11 \cdot 10^{-5}$
S	$3,64 \cdot 10^{-3}$	$1,61 \cdot 10^{-6}$	Ce	$3,08 \cdot 10^{-5}$	$2,68 \cdot 10^{-7}$
Cl	$9,39 \cdot 10^{-3}$	$8,25 \cdot 10^{-3}$	Pr	$6,31 \cdot 10^{-7}$	$2,14 \cdot 10^{-8}$
Ar	$3,07 \cdot 10^{-1}$	$3,74 \cdot 10^{-6}$	Nd	$6,02 \cdot 10^{-3}$	$6,29 \cdot 10^{-8}$
K	$1,53 \cdot 10^{-1}$	$4,99 \cdot 10^{-4}$	Sm	1,30	$5,69 \cdot 10^{-5}$

γ -Dosisrate [Sv/h]					
Element	200 a	10 000 a	Element	200 a	10 000 a
Ca	$1,27 \cdot 10^{-2}$	$1,95 \cdot 10^{-4}$	Eu	3,85	$2,19 \cdot 10^{-4}$
Sc	$1,82 \cdot 10^{-3}$	$7,69 \cdot 10^{-9}$	Gd	$1,79 \cdot 10^1$	$9,52 \cdot 10^{-3}$
Ti	$6,06 \cdot 10^{-4}$	$4,66 \cdot 10^{-12}$	Tb	$1,39 \cdot 10^2$	$2,30 \cdot 10^{-1}$
V	$1,23 \cdot 10^{-7}$	$7,26 \cdot 10^{-16}$	Dy	$3,36 \cdot 10^2$	1,17
Cr	$3,75 \cdot 10^{-8}$	$6,56 \cdot 10^{-16}$	Ho	$2,65 \cdot 10^2$	$9,21 \cdot 10^{-1}$
Mn	$1,80 \cdot 10^{-10}$	$1,79 \cdot 10^{-10}$	Er	8,23	$2,92 \cdot 10^{-2}$
Fe	$1,52 \cdot 10^{-6}$	$1,51 \cdot 10^{-6}$	Tm	$1,66 \cdot 10^{-2}$	$5,78 \cdot 10^{-5}$
Co	$1,28 \cdot 10^{-2}$	$1,27 \cdot 10^{-2}$	Yb	$7,11 \cdot 10^{-3}$	$1,25 \cdot 10^{-5}$
Ni	$1,03 \cdot 10^{-4}$	$1,02 \cdot 10^{-4}$	Lu	$1,91 \cdot 10^{-1}$	$6,46 \cdot 10^{-4}$
Cu	$7,15 \cdot 10^{-5}$	$7,11 \cdot 10^{-5}$	Hf	$1,64 \cdot 10^{-1}$	$4,16 \cdot 10^{-3}$
Zn	$4,50 \cdot 10^{-6}$	$4,48 \cdot 10^{-6}$	Ta	$3,66 \cdot 10^{-4}$	$1,64 \cdot 10^{-4}$
Ga	$2,16 \cdot 10^{-9}$	$2,15 \cdot 10^{-9}$	W	$6,23 \cdot 10^{-2}$	$2,43 \cdot 10^{-4}$
Ge	$1,23 \cdot 10^{-10}$	$1,22 \cdot 10^{-10}$	Re	$4,28 \cdot 10^{-1}$	$5,12 \cdot 10^{-4}$
As	$4,27 \cdot 10^{-11}$	$4,13 \cdot 10^{-11}$	Os	3,99	$2,51 \cdot 10^{-6}$
Se	$7,33 \cdot 10^{-6}$	$7,09 \cdot 10^{-6}$	Ir	2,27	$3,50 \cdot 10^{-11}$
Br	$1,39 \cdot 10^{-2}$	$1,35 \cdot 10^{-2}$	Pt	$4,06 \cdot 10^{-1}$	$3,53 \cdot 10^{-10}$
Kr	$3,07 \cdot 10^{-3}$	$2,76 \cdot 10^{-3}$	Au	$4,94 \cdot 10^{-5}$	$9,57 \cdot 10^{-9}$
Rb	$9,83 \cdot 10^{-6}$	$5,88 \cdot 10^{-7}$	Hg	$3,93 \cdot 10^{-5}$	$2,41 \cdot 10^{-8}$
Sr	$1,20 \cdot 10^{-5}$	$1,08 \cdot 10^{-6}$	Tl	$7,57 \cdot 10^{-6}$	$4,73 \cdot 10^{-6}$
Y	$5,96 \cdot 10^{-5}$	$1,02 \cdot 10^{-7}$	Pb	$1,22 \cdot 10^{-3}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
Zr	$8,67 \cdot 10^{-3}$	$6,13 \cdot 10^{-3}$	Bi	$3,66 \cdot 10^1$	8,12
Nb	$1,08 \cdot 10^2$	$7,75 \cdot 10^{-1}$			

Tabelle 15. γ -Dosisraten für alle stabilen Elemente von H - Bi: Angegeben ist jeweils die γ -Dosisrate 200 Jahre und 10 000 Jahre nach Ende der Bestrahlung in Sievert pro Stunde.

Element	Konzentration	Element	Konzentration	Element	Konzentration	Element	Konzentration
Al	1 ppm	Ni	10 ppm	Ag	0,001 ppm	Ho	0,01 ppm
Si	100 ppm	Cu	10 ppm	Sn	30 ppm	Hf	1 ppm
K	2 ppm	Zr	1 ppm	Nd	2 ppm	Re	1 ppm
Ca	2 ppm	Nb	0,01 ppm	Sm	0,5 ppm	Os	0,1 ppm
Ti	200 ppm	Mo	1 ppm	Eu	0,02 ppm	Ir	0,1 ppm
Co	10 ppm	Ru	10 ppm	Tb	0,01 ppm	Bi	0,1 ppm

Tabelle 16. Erlaubte maximale Konzentrationen wichtiger Verunreinigungen: in OPTIFER I. Die Konzentrationen wurden soweit erniedrigt, daß sie für die γ -Dosisrate keine wesentliche Rolle mehr spielen.

Für die Legierung OPTIFER I wurden in mehreren Rechenschritten die Konzentrationen der wichtigsten Verunreinigungen soweit erniedrigt, daß sie für die γ -Dosisrate keinen wesentlichen Beitrag mehr liefern. Tabelle 16 zeigt das Ergebnis dieser Rechnungen. Dasselbe kann man jetzt auch für andere Legierungen machen, stößt dabei jedoch bald auf Grenzen, denn für eine Legierung wie V-5Ti-5Cr ergeben sich Konzentrationen, die schon auf den ersten Blick als unrealistisch erkennbar sind. Diese unrealistischen Werte ergeben sich, da die Elemente Titan, Chrom und Vanadin mit die niedrigsten Langzeit- γ -Dosisraten überhaupt haben. Hier kann das Ziel nur lauten so wenig Verunreinigungen wie möglich. Damit stellt sich die Frage, was denn technisch zur Zeit in etwa möglich ist. Tabelle 17 auf Seite 50 wurde einem Artikel von Butterworth [57] aus dem Jahre 1988 entnommen. Die Angaben sind Abschätzungen dessen, was der Autor bei der Herstellung von Stählen für möglich hält. Tabelle 18 auf Seite 50 enthält dagegen Analyseergebnisse der in Japan 1994 erschmolzenen Testlegierung F82H mod [58]. Die in Tabelle 19 auf Seite 50 enthaltenen Werte entstammen einer Untersuchung, die von Johnson Matthey im Auftrag von Euratom durchgeführt wurde [59]. Dabei wurden Titan-, Chrom- und Vanadinproben von verschiedenen Herstellern auf ihren Gehalt an Verunreinigungen untersucht. Für fast jedes stabile Element des Periodensystems wurde entweder die ermittelte Konzentration angegeben oder die Nachweisgrenze, wenn das Element selbst nicht nachgewiesen werden konnte. Ausgenommen wurden nur die Edelgase und das Element Wasserstoff, die auf Grund ihrer Flüchtigkeit leicht zu verringern sind. In Tabelle 19 auf Seite 50 wurden die niedrigsten Werte für die wichtigsten Verunreinigungen zusammengestellt. Man kann sagen, daß diese Werte die derzeitige Grenze des technisch möglichen widerspiegeln. Als besonders kritisch erweisen sich dabei der Gehalt an Niob, Silber und Wismut, was leicht zu verstehen ist, wenn man die γ -Dosisraten dieser Elemente in Tabelle 15 auf Seite 47 anschaut. Andererseits zeigt die Untersuchung, daß die Elemente Cäsium bis Platin, die ja ebenfalls hohe Dosisraten liefern, nur in so geringen Mengen vorkommen, daß sie keine Rolle mehr spielen.

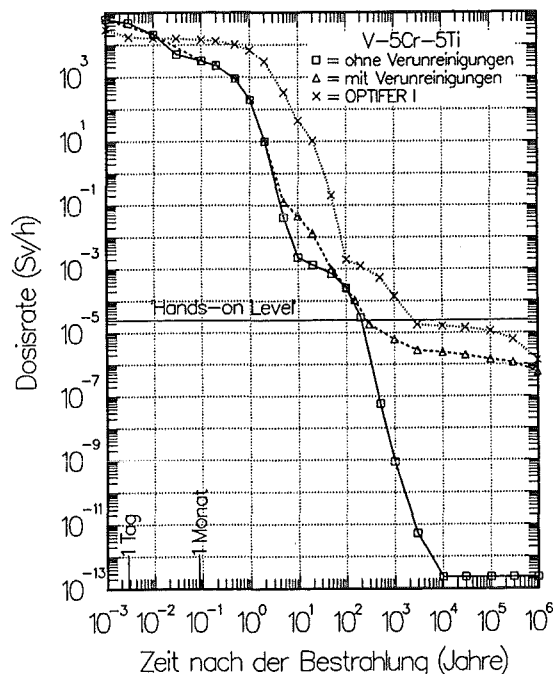


Abbildung 14. Vergleich der Dosisraten von V-5Ti-5Cr mit und ohne Verunreinigungen: sowie von OPTIFER I mit den in Tabelle 16 auf Seite 48 angegebenen Verunreinigungen

Abbildung 14 zeigt die Dosisraten von V-5Ti-5Cr ohne Verunreinigungen, mit den in Tabelle 19 auf Seite 50 angegebenen Verunreinigungen sowie OPTIFER I mit den in Tabelle 16 auf Seite 48 definierten Verunreinigungen. Daraus ersieht man, daß die Vanadinlegierung zum gegenwärtigen Zeitpunkt nur einen begrenzten Vorteil gegenüber einer Legierung vom Typ OPTIFER besitzt. Dazu sei auch noch erwähnt, daß man sich die niedrigere Langzeitdosisrate bei der Vanadinlegierung mit einer rund doppelt so hohen Anfangsdosisrate erkauft.

Element	Konzentration	Element	Konzentration	Element	Konzentration	Element	Konzentration
Al	10 ppm	Cu	20 ppm	Sn	10 ppm	Eu	0,02 ppm
K	2 ppm	Zr	30 ppm	Ba	2 ppm	Tb	0,5 ppm
Ca	2 ppm	Nb	0,2 ppm	Ce	4 ppm	Ho	0,01 ppm
Co	10 ppm	Mo	50 ppm	Nd	2 ppm	Ir	0,1 ppm
Ni	4 ppm	Ag	0,5 ppm	Sm	0,5 ppm	Bi	2 ppm

Tabelle 17. Geschätzte Konzentration von Verunreinigungen in einem hochreinen Stahl [57]

Element	Konzentration	Element	Konzentration	Element	Konzentration	Element	Konzentration
Al	30 ppm	Ti	100 ppm	Ni	200 ppm	Nb	1 ppm
Si	1100 ppm	Co	50 ppm	Cu	100 ppm	Mo	30 ppm

Tabelle 18. Auszug aus der chemischen Analyse des Stahls F82H mod.

Element	Konzentration	Element	Konzentration	Element	Konzentration	Element	Konzentration
Al	3 ppm	Ca	15 ppm	Cu	0,3 ppm	Ag	0,03 ppm
Si	300 ppm	Fe	3 ppm	Zr	0,08 ppm	Cd	0,02 ppm
Cl	7 ppm	Co	0,02 ppm	Nb	0,01 ppm	Ba	0,2 ppm
K	15 ppm	Ni	0,03 ppm	Mo	0,15 ppm	Bi	0,007 ppm

Tabelle 19. Auszug aus chemischen Analysen von Vanadinproben

4.2.4 Ausblick

Bei der Entwicklung neuer Strukturwerkstoffe für die erste Wand und das Blanket konzentriert sich das Interesse zur Zeit vor allem auf zwei Werkstoffklassen, zum einen die 8 - 10 % CrWVTa-Stähle wie OPTIFER oder F82H und zum anderen Vanadinlegierungen wie V-5Ti-5Cr. Dabei sind die Stähle die besser bekannte Stoffklasse, während die Vanadinlegierungen möglicherweise das größere Entwicklungspotential besitzen. Nur weitere Untersuchungen können zeigen, welches Material als Werkstoff besser geeignet ist. Darüberhinaus hängt die Entscheidung für einen bestimmten Werkstoff nicht nur von naturwissenschaftlichen Gesichtspunkten ab, von denen in dieser Arbeit nur die radiologischen untersucht werden.

Im Zusammenhang mit den Legierungen wurde bisher nicht auf die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen eingegangen, was daran liegt, daß sie bei den hier untersuchten Materialien keine Rolle spielen. Bei den Stählen war das zu erwarten, da die sequentiellen Reaktionen auch für Eisen keine Rolle spielen. Anders dagegen ist es bei den Vanadinlegierungen. Vanadin selbst zeigt einen deutlichen Effekt, der jedoch bei den

Legierungen durch das Titan überdeckt wird. Auch die Verunreinigungen bewirken, daß der Effekt der sequentiellen Reaktionen nicht mehr sichtbar ist [60].

Ein weiterer Punkt wurde bisher nicht angesprochen, nämlich in wie weit sich die hier erzielten Ergebnisse verallgemeinern lassen, oder anders ausgedrückt, welchen Einfluß hat die Wahl der Parameter auf das Ergebnis. Wie zu Anfang dieses Kapitels ausgeführt, wurden für die Rechnungen folgende Parameter gewählt: als Neutronenspektrum das Spektrum der ersten Wand des EEF-Reaktors, als Bestrahlungsbelastung 5 MW/m² und als Bestrahlungsdauer 2,5 Jahre. Für alle drei Parameter gilt, daß die Auswirkungen einer Änderung stark von der untersuchten Reaktion abhängen, das heißt von der Energieabhängigkeit des Reaktionsquerschnittes und von der Halbwertszeit des Reaktionsproduktes. Erschwerend kommt hinzu, daß nicht nur Ein-Schritt-Reaktionen zu betrachten sind, sondern vor allem bei den langlebigen Reaktionsprodukten häufig lange Reaktionsketten auftreten, deren Verhalten sich nur schwer vorhersagen läßt. Eine Untersuchung dieses Gesichtspunktes findet sich in Referenz [61]. Sie wurde ebenfalls mit Hilfe des Programmpakets EASY durchgeführt.

5. Integrale Aktivierungsexperimente an V, Cr und Fe

Integrale Aktivierungsexperimente erschienen aus zwei Gründen notwendig. Wie schon weiter oben erwähnt, ergibt sich aus der Tatsache, daß viele Wirkungsquerschnitte in der EAF-Bibliothek nicht experimentell gemessen sind, eine relativ große Datenunsicherheit. Integrale Experimente helfen diese Unsicherheit einzugrenzen und geben einen Hinweis darauf, welche Wirkungsquerschnitte noch genauer bestimmt werden müssen. Der zweite Grund war, den Effekt der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen experimentell zu bestätigen. Um derartige Aktivierungsexperimente durchzuführen, wurde am Karlsruher Isochron-Zyklotron (KIZ) eine neue Bestrahlungseinrichtung geschaffen.

5.1 Aufbau des Aktivierungsexperimentes

Bei einem Aktivierungsexperiment wird eine Probe zunächst mit Teilchen bestrahlt, so daß durch die verschiedenen möglichen Kernreaktionen radioaktive Kerne entstehen. Nach der Bestrahlung werden die radioaktiven Kerne durch die Messung der beim Zerfall ausgesandten γ -Quanten nachgewiesen. In diesem Experiment werden die Proben mit Neutronen bestrahlt. Für die Neutronenproduktion wird der Deuteronenstrahl des KIZ auf ein Target gelenkt. Im Target werden durch verschiedene Kernreaktionen Neutronen freigesetzt. Besondere Bedeutung kommt dabei der Pick-up- und der Aufbruchreaktion der Deuteronen zu. Bei der Aufbruchreaktion werden Neutron und Proton im Kernfeld getrennt. Bei der Pick-up-Reaktion wird das Proton vom Kern eingefangen. Dabei ist die Neutronenausbeute am größten, wenn man Targetmaterialien mit niedriger Ordnungszahl benutzt. Deshalb wird Beryllium ($Z=4$) als Targetmaterial verwendet. Da die zu bestrahlenden Proben unmittelbar hinter dem neutronenproduzierenden Target befestigt werden, muß das Target dick genug sein, um alle Deuteronen und die beim Aufbruch entstehenden Protonen im Target abzustoppen. Die mittlere Reichweite von 52 MeV Deuteronen in Beryllium beträgt 9.1 mm. Deshalb wurde für das Target eine Dicke von 12 mm gewählt. Die Proben haben eine Größe von $10 \times 11 \times 1$ mm³ (B * H * T). Abbildung 15 auf Seite 52 zeigt schematisch die Anordnung von Target und Probe.

Dieses Target kann mit Strahlströmen bis zu etwa 25 μ A belastet werden. Begrenzende Faktoren sind die Hitzebeständigkeit von Beryllium (Schmelzpunkt 1278 °C) sowie die Möglichkeiten zur Kühlung des Targets. Der Deuteronenstrahl besitzt einen elliptischen Querschnitt von 2 mm * 4 mm. Zu Testzwecken und ersten Bestrahlungen wurde ein Target gleicher Bauart aus Kupfer verwendet. Damit konnten zwar noch höhere Strahl-

ströme erzielt werden (bis zu $32 \mu\text{A}$) - denn Kupfer besitzt eine höhere Wärmeleitfähigkeit - aber den höheren Neutronenfluß erhält man mit Beryllium [62]. Eine genaue Beschreibung des Neutronenspektrums erfolgt in Kap. 5.4 im Zusammenhang mit den Vergleichsrechnungen.

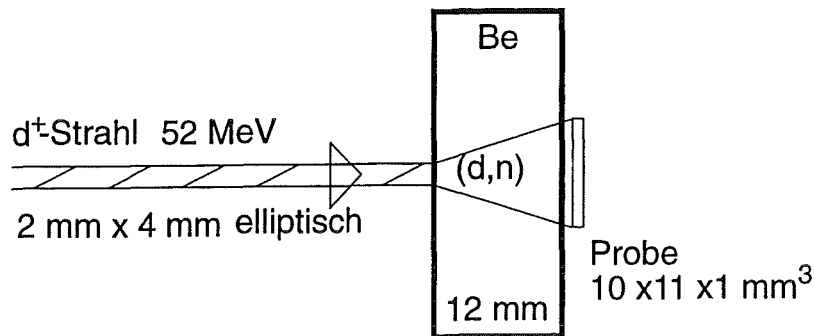


Abbildung 15. Schematische Darstellung der Anordnung von Target und Probe

Nach der Bestrahlung wurden mit Hilfe eines Reinstgermaniumdetektors die Energien der beim Zerfall der radioaktiven Kerne entstehenden γ -Quanten gemessen und mit einem Vielkanalanalysator gezählt. Der Vielkanalanalysator ist mit einem PC gekoppelt, sodaß die aufgenommenen Spektren sofort abgespeichert und sofort oder später ausgewertet werden können. Auf diese Weise wurden von jeder Probe eine Reihe von Spektren aufgenommen, um damit die entstandenen Radionuklide qualitativ und quantitativ zu bestimmen.

5.2 Auswertung der γ -Spektren

Die so gewonnenen γ -Spektren werden in mehreren Schritten ausgewertet:

1. Energieeichung und Bestimmung der Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors
2. Suche nach Peaks mit Bestimmung der Energie, der Nettozählrate und des statistischen Fehlers
3. Identifizierung von Radionukliden und Bestimmung der Anfangsaktivität
4. Bestimmung von Halbwertszeiten

Dabei wird für die ersten drei Schritte das Programm Gamma Vision® [63] der Firma EG & G Ortec benutzt. Es dient dazu die mit dem Vielkanalanalysator aufgenommenen γ -Spektren auf dem PC darzustellen, sie abzuspeichern und zu analysieren. Die Bestimmung der Halbwertszeiten wird zusätzlich durchgeführt, zum einen als Kontrolle der Ergebnisse, zum anderen um bei Radionukliden die γ -Quanten gleicher Energie aussenden eine Unterscheidung vornehmen zu können.

5.2.1 Energieeichung und Nachweiswahrscheinlichkeit

Die ersten Schritte der Auswertung sind die Energieeichung, d.h. die Bestimmung der Relation zwischen den Kanalnummern des Vielkanalanalysators und der Energie der in diesem Kanal gezählten γ -Quanten, sowie die Bestimmung der Nachweiswahrscheinlichkeit, die angibt wie empfindlich der Detektor bei einer bestimmten Energie für γ -Quanten ist. Um diese beiden Relationen zu bestimmen wird ein Spektrum mit

γ -Strahlungsquellen bekannter Stärke und Energie aufgenommen. In diesem Fall wurden die in Tabelle 20 auf Seite 53 angegebenen Quellen benutzt.

Nuklid	Aktivität [MBq]	Halbwertszeit [a]	Energie der γ -Quanten [keV]	relative Häufigkeit
^{22}Na	$375,6 \pm 13,7$	2,602	511,00	1,811
			1274,55	0,999
^{60}Co	$382,2 \pm 7,4$	5,271	1173,24	0,999
			1332,51	1,000
^{133}Ba	$393,3 \pm 18,9$	10,7	81,00	0,338
			276,40	0,071
			302,86	0,187
			356,01	0,619
			383,86	0,089
^{137}Cs	$400,7 \pm 14,1$	30,17	661,66	0,851
^{152}Eu	$421,8 \pm 36,6$	12,9	121,78	0,281
			244,69	0,074
			344,28	0,263
			367,79	0,008
			411,12	0,022
			443,98	0,030
			778,90	0,128
			867,39	0,041
			964,12	0,143
			1085,91	0,096
			1112,12	0,134
1408,01	0,206			
^{241}Am	$418,5 \pm 20,7$	433	59,54	0,353

Tabelle 20. Benutzte Eichquellen: Die hier beschriebenen Eichquellen stehen in der Hauptabteilung Zyklotron zur Verfügung. Die angegebenen Aktivitäten beziehen sich auf den 12. Juni 1979 12:00 Uhr GMT. Die relative Häufigkeit ist die Anzahl der mit dieser Energie ausgesandten γ -Quanten durch die Anzahl der Zerfälle des Nuklids.

Bei einem guten Detektorsystem sollte der Zusammenhang zwischen Energie und Kanalnummer weitgehend linear sein. Bei der Energieeichung wird deshalb der Peak lokalisiert und der Energie der entsprechenden γ -Linie zugeordnet. An diese Wertepaare wird ein quadratisches Polynom angepaßt.

$$E = a_0 + a_1 K + a_2 K^2$$

E: Energie in keV
 a_i : Koeffizienten
 K: Kanalnummer

Der Koeffizient a_0 dient dazu, die Nichtlinearität der Meßanordnung im niederenergetischen Bereich auszugleichen, während a_1 das Verhältnis von Energie zu Kanalnummer ausdrückt. Der Koeffizient des quadratischen Gliedes ist dabei ein Maß für die Linearität des Detektorsystems; er sollte in einer Größenordnung von 10^{-7} bis 10^{-8} liegen. Die mit obigen Eichquellen durchgeführte Eichung ergab folgende Koeffizienten:

$$a_0 = -4,008 \qquad a_1 = 1,006 \qquad a_2 = 4,445 \times 10^{-8}$$

Die mit Hilfe dieser Eichung bestimmten Energien der Peaks haben eine Ungenauigkeit von ≤ 1 keV im Bereich zwischen etwa 50 keV und 4 MeV. Gleichzeitig mit der Energieeichung werden die vollen Halbwertsbreiten der Peaks bestimmt. Auch an diese wird ein quadratisches Polynom angepaßt. Die Halbwertsbreiten sind jedoch nicht nur von der Energie abhängig.

Die totale Nachweiswahrscheinlichkeit bei einer bestimmten Energie ist das Verhältnis aus nachgewiesenen zu erzeugten γ -Quanten. Um dieses Verhältnis zu bestimmen, werden die Nettozählraten der Peaks durch die Anzahlen der zu erwartenden γ -Quanten dividiert und der entsprechenden Energie zugeordnet. An diese Wertepaare wird folgende empirische Funktion angepaßt:

$$\varepsilon_E = \exp\left(\sum_{i=1}^6 b_i E^{2-i}\right)$$

ε_E : Nachweiswahrscheinlichkeit
 b_i : Koeffizienten
 E : Energie in MeV

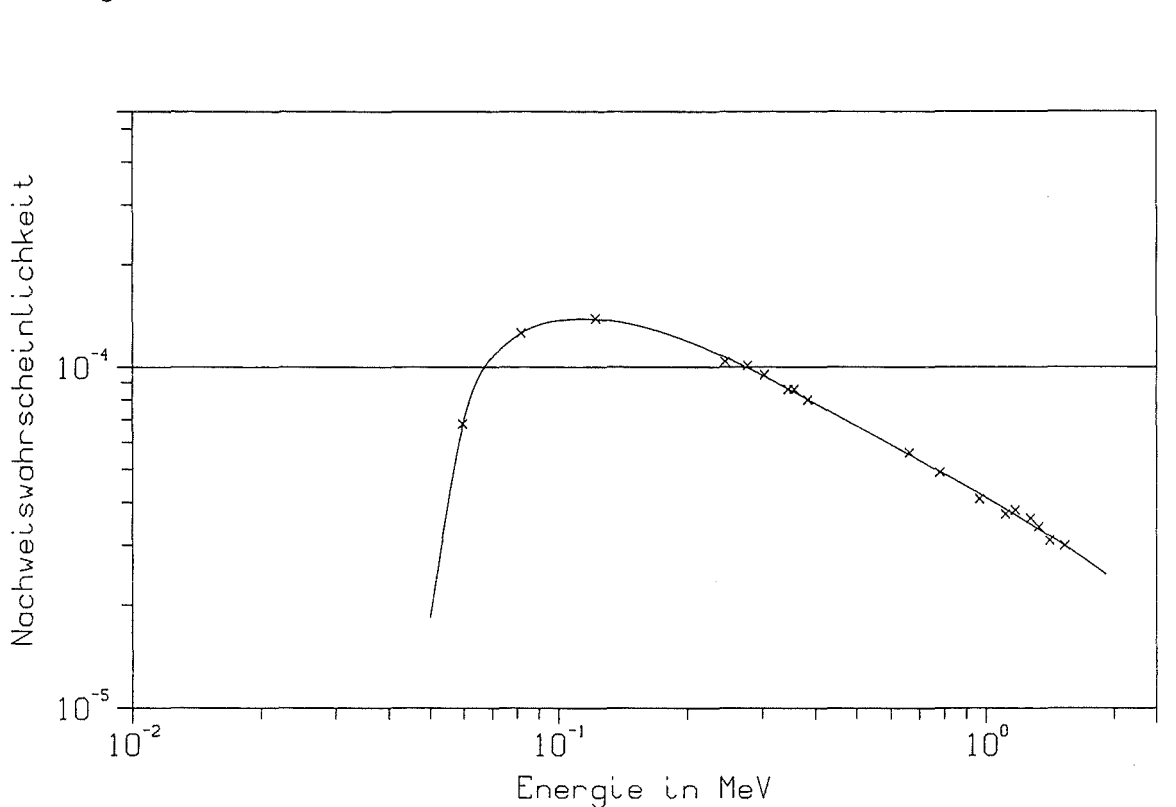


Abbildung 16. Verlauf der Nachweiswahrscheinlichkeit

Die totale Nachweiswahrscheinlichkeit enthält nicht nur die Wahrscheinlichkeit, daß ein eintreffendes γ -Quant im Photopeak registriert wird, sondern auch die Verluste durch die Geometrie der Meßanordnung. Da sich die Proben in einem Abstand von $r = 89,3$ cm zum Detektor befanden, und der Detektor eine Fläche von $A = 23,4$ cm² hat, ergibt sich ein Geometriefaktor von $4\pi r^2/A = 4280$, wenn man die Probe als punktförmige Quelle ansieht. Für die Berechnung der Nuklidaktivitäten wird allerdings die totale Nachweiswahrscheinlichkeit benötigt, und deshalb auch direkt bestimmt. Die totalen Nachweiswahrscheinlichkeiten liegen zwischen $6,8 \cdot 10^{-5}$ für 60 keV, $1,4 \cdot 10^{-4}$ für 121 keV und $3,0 \cdot 10^{-5}$ für 1528 keV. Abbildung 16 zeigt den Verlauf der Nachweiswahrscheinlichkeit. Der Abfall der Nachweiswahrscheinlichkeit bei höheren Energien beruht auf der geringeren Reaktionswahrscheinlichkeit der γ -Quanten mit Materie. Beim Nachweis von γ -Quanten mit Ener-

gien kleiner 100 keV führen dagegen Selbstabsorbtionseffekte im Detektor zu einer schnellen Abnahme.

5.2.2 Suche nach Peaks

Der wichtigste Schritt der Analyse eines γ -Spektrums ist die Suche nach Peaks. Das Programm Gamma Vision® tut diesen Schritt in zweifacher Weise. Neben dem zu untersuchenden Spektrum benötigt das Programm dazu eine Nuklidbibliothek die Angaben über die Halbwertszeiten der Nuklide enthält, sowie die Energien der ausgesandten γ -Quanten und deren relative Häufigkeiten. Bei einem ersten Durchlauf berechnet das Programm auf Grund des Spektrums für alle in der Bibliothek enthaltenen γ -Energien den Untergrund, die Nettozählrate und den Schwerpunkt des Peaks, unter der Annahme, daß jeder Peak ein Singlet bildet, d.h., daß die einzelnen Peaks ausreichend weit voneinander getrennt sind.

Um den Untergrund zu berechnen, wird für einen Bereich zwischen dem Schwerpunkt des Peaks, wie er sich aus der Nuklidbibliothek ergibt, und einem Kanal mit einem Abstand des Dreifachen der vollen Halbwertsbreite zum Schwerpunkt über jeweils fünf Kanäle der Mittelwert gebildet und dieser Wert dem mittleren Kanal zugeordnet. Die Minima oberhalb und unterhalb des Peaks werden dazu benutzt um eine Gerade festzulegen mit deren Hilfe der Untergrund bestimmt wird. Für die Nettozählrate werden zunächst alle Kanalinhalt zwischen den Minimumskanälen einschließlich dieser aufsummiert, d.h. die Gesamtzählrate ermittelt. Danach wird der Untergrund abgezogen. Der statistische Fehler der Nettozählrate ist die Wurzel aus der Summe der Quadrate der Fehler der Gesamtzählrate und des Untergrundes. Der Fehler der Gesamtzählrate ist die Wurzel aus der Gesamtzählrate. Der Fehler des Untergrundes ergibt sich wie folgt:

$$F_U = \sqrt{\frac{\text{Untergrund} \times \text{Peakbreite}}{\text{Anzahl der zur Mittelung benutzten Kanäle} (2 \times 5)}}$$

Die Peakbreite ist der Bereich zwischen den Minimumskanälen. Der Schwerpunkt des Peaks ist das gewichtete Mittel über einen Bereich, der wie folgt definiert ist. Für einen Peak mit Gaußform ist die volle Breite bei einem Fünfundzwanzigstel des Maximums gleich dem 2,2-fachen der vollen Halbwertsbreite. Die Kanäle, die sich innerhalb dieses Abstands vom Schwerpunkt befinden, wie er sich aus der Energie der Nuklidbibliothek ergibt, werden für die Mittelung benutzt.

Da man mit dem oben beschriebenen Verfahren nur selten alle Peaks erfaßt, wird in einem zweiten Durchlauf ein Verfahren angewendet, das von Mariscotti beschrieben wurde. Dazu wird angenommen, daß das Spektrum eine diskrete Funktion darstellt, und daß der Untergrund in der Nähe der Peaks flach ist. Aus letzter Forderung ergibt sich, daß die zweite Ableitung des Spektrums für den Untergrund Null und für den Bereich des Peaks von Null verschieden ist. Bei einer diskreten Funktion tritt an die Stelle der zweiten Ableitung die zweite Differenz. Um den Effekt der statistischen Schwankungen zu reduzieren, wird bei der Analyse des Spektrums die geglättete zweite Differenz benutzt, die sich in allgemeiner Form so darstellen läßt:

$$C''(n) = \sum_{i=0}^{2j} k_i C(n - j + i)$$

Dabei sind die k_i Gewichtsfunktionen für die geglättete zweite Differenz, und $2j + 1$ ist die Anzahl der Kanäle, über die geglättet wird. Um Bedingungen für die Akzeptanz eines Peaks abzuleiten wird angenommen, daß die Peaks Gaußform besitzen. Die so abgeleiteten Bedingungen sind:

$$C''(n) < -2 \times \sqrt{C(n) \sum_{i=0}^{2j} k_i^2}$$

$$C''(n) < G \times C''(n \pm 1)$$

G: Konstante proportional zur Auflösung des Detektors

k_i : Gewichtsfunktionen

$C(n)$: Inhalt des n-ten Kanals

$C''(n)$: zweite Differenz für den n-ten Kanalen

Ist ein Peak gefunden, wird er gespeichert und die Suche zwei Kanäle später fortgesetzt. Außerdem werden, wenn er nicht schon in der Nuklidbibliothek enthalten ist, der Untergrund, die Nettozählrate, der statistische Fehler und der Schwerpunkt in der selben Art berechnet wie bei den Bibliothekpeaks. Der Peak wird akzeptiert wenn der Fehler der Nettozählrate unterhalb einer vom Benutzer bestimmten Grenze liegt. Bisher wurde immer davon ausgegangen, daß die Peaks weit genug voneinander entfernt sind, sodaß sie sich nicht gegenseitig beeinflussen. Bedingung dafür ist daß der Abstand zwischen ihnen größer ist als das 3,3-fache ihrer vollen Halbwertsbreite. Andernfalls geht das Programm davon aus, daß es sich um ein Multiplet handelt. Der Untergrund eines Multiplets wird ähnlich bestimmt wie der eines Singlets mit dem Unterschied, daß der zu untersuchende Bereich vom Anderthalbfachen der vollen Halbwertsbreite unterhalb des niederenergetischen Peaks bis zum Anderthalbfachen der vollen Halbwertsbreite oberhalb des höchstenergetischen Peaks des Multiplets reicht. Die Nettozählraten der einzelnen Peaks werden dadurch bestimmt, daß das Programm versucht, eine Summe aus gaußförmigen Peaks an das Spektrum nach Abzug des Untergrundes anzupassen.

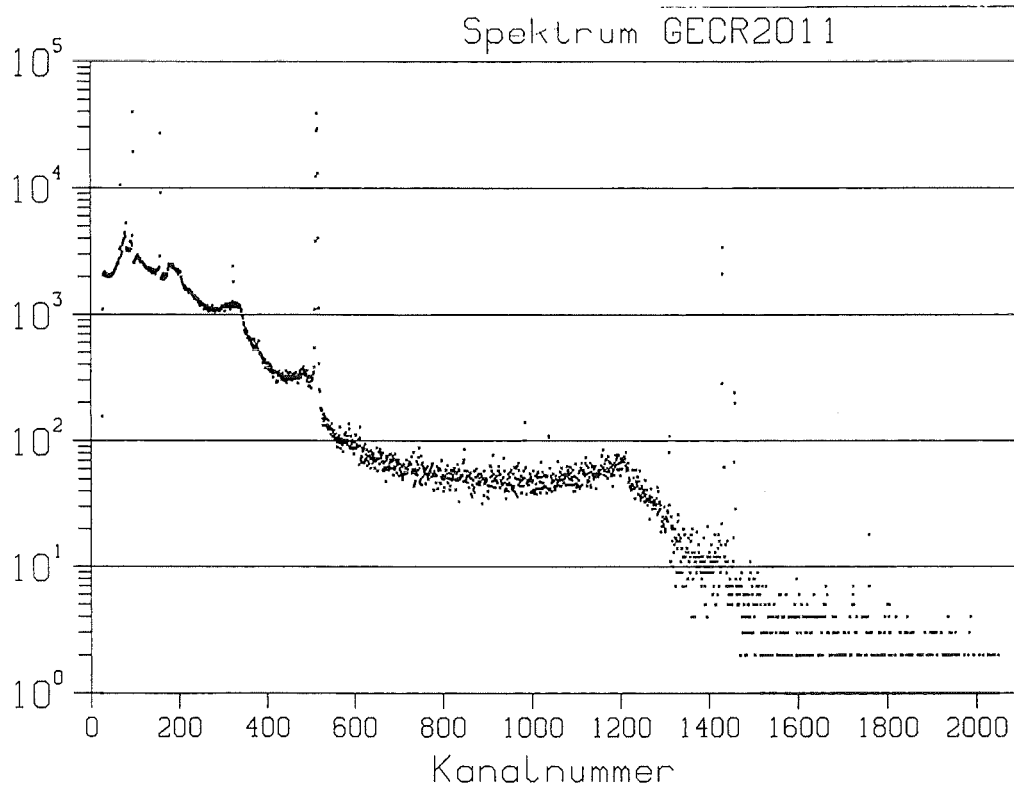


Abbildung 17. Beispiel für ein Spektrum

Abbildung 17 zeigt ein typisches Spektrum, wie es mit der hier beschriebenen Meßapparatur aufgenommen wurde. Gemessen wurde die γ -Strahlung aus der Probe Cr2 47,28 Minuten nach dem Ende der Bestrahlung während 10,65 Minuten. Unten ist ein Auszug aus der Analyse wiedergegeben, die mit dem Programm Gamma Vision erstellt wurde.

```

***** UNIDENTIFIED PEAK SUMMARY *****
PEAK CENTROID BACKGROUND NET AREA INTENSITY UNCERT FWHM SUSPECTED
CHANNEL ENERGY COUNTS COUNTS CTS/SEC 1 SIGMA % keV NUCLIDE
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
  71.99   68.18   14227.   126.    .211  133.69  1.327  -    D
  78.93   75.16   14634.   1370.   2.283  17.87   .973  -
  88.48   84.78   87948.   1737.   2.894  24.27   1.337  -    D
 162.32  159.07   11930.   426.    .710  36.57   1.380  -    D
 174.01  170.83   28109.   427.    .711  55.78   1.387  -    D
 322.17  319.90   6942.    2133.   3.555   9.81   1.619  Ti-Cr-51s
 512.03  510.90   16581.  114977. 191.628  .35   3.072  Ann    s
 610.02  609.49   541.     85.     .142  40.09   1.617  -    D
 981.59  983.30   349.     162.    .270  19.27   1.697  Sc-V-48 s
1308.31 1311.98   183.     169.    .282  15.86   1.904  Sc-V-48
1429.77 1434.17   132.    6857.   11.428  1.25   1.923  V-Mn-52g
1456.27 1460.82    79.     523.    .872   5.45   2.126  K-40
1757.84 1764.19    14.     31.     .051  27.63   1.513  -    s
2603.27 2614.59    3.      69.     .114  12.69   2.138  -

```

s Peak fails shape tests.
D Peak area deconvoluted.

```

***** IDENTIFIED PEAK SUMMARY *****
NUCLIDE PEAK CENTROID BACKGROUND NET AREA INTENSITY UNCERT FWHM
CHANNEL ENERGY COUNTS COUNTS CTS/SEC 1 SIGMA % keV
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
Cr-49   66.14   62.30   32784.   9903.   16.505  2.77  1.324D
Cr-49   94.27   90.60   16439.   57312.  95.521  .52  1.341D
Cr-49  156.19  152.90  25190.   36360.  60.600  .81  1.377D
Sc-48  178.55  175.40  16869.    469.    .782  39.44  1.390D
Mn-52m  379.52  377.59   2008.    229.    .382  39.69  2.045s
Ti-51   609.03  608.50    622.     4.     .006  930.23 1.616D
Mn-52g  743.51  743.78    333.     62.    .103  43.52  1.768s
Mn-56   845.32  846.22    323.     55.    .092  48.14  1.629
Ti-51   927.21  928.60    610.     2.     .003  2073.03 1.758D
Mn-52g  934.07  935.50    317.     49.    .081  53.82  1.760D
V-53  1004.17 1006.02    244.     14.    .023  160.04  .906
Sc-48  1035.39 1037.43    324.    132.    .219  22.64  2.092
Sc-48  1209.85 1212.93    256.     8.     .013  233.63  .794
V-53  1286.96 1290.51    164.     8.     .013  229.13  1.363
V-52  1528.88 1533.87    13.     3.     .004  187.08  .981
Mn-56  1804.10 1810.72    11.     11.    .018  61.72  1.872s
Mn-56  2101.00 2109.38     6.     3.     .005  129.10  .251s
Mn-56  2511.00 2521.79     1.     1.     .001  100.00  .402s

```

s Peak fails shape tests.
D Peak area deconvoluted.

Abbildung 18. Auszug aus dem Analyseergebnis für obiges Spektrum

5.2.3 Anfangsaktivität

Mit Hilfe der relativen Häufigkeiten aus der Nuklidbibliothek und der Nachweiswahrscheinlichkeit aus der Eichung berechnet das Programm für jede Energie aus der Nettozählrate die Aktivität des zugehörigen Nuklids.

$$A_E = \frac{N_E}{\varepsilon_E \times t \times \gamma_r}$$

A_E : Aktivität des Nuklids auf Grund der γ -Quanten der Energie E

N_E : Nettozählrate des Peaks bei der Energie E

ε_E : Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors bei der Energie E

t: Meßzeit minus Totzeit des ADC

γ_r : relative Häufigkeit von γ -Quanten der Energie E

Diese Aktivität kann zusätzlich korrigiert und auf einen vom Benutzer angegebenen Zeitpunkt zurückgerechnet werden. Die Korrektur bezieht sich auf den Fall, daß die Halbwertszeit des Nuklids ungefähr genauso lang oder kürzer ist als die Meßzeit. Der Korrekturfaktor ist:

$$K = \frac{\ln 2 \times \frac{\text{Meßzeit}}{\text{Halbwertszeit}}}{1 - \exp\left(-\ln 2 \times \frac{\text{Meßzeit}}{\text{Halbwertszeit}}\right)}$$

Auf diese Weise kann man für die Nuklide der Bibliothek diejenige Aktivität erhalten, die sie unmittelbar nach Ende der Bestrahlung hatten. Woraus sich dann leicht das Anfangs-inventar der Probe errechnen läßt. Dies soll dann mit den Ergebnissen einer Aktivierungsrechnung verglichen werden.

5.2.4 Halbwertszeitberechnung

Da zu jeder Probe eine Reihe von Spektren aufgenommen wurde, ist es möglich aus den Nettozählraten der verschiedenen γ -Linien die Halbwertszeiten für die einzelnen Nuklide zu bestimmen. Die Nettozählraten, die zu einer bestimmten Energie gehören, werden logarithmiert und über der Zeit aufgetragen. Der Rechner ermittelt daraus eine oder mehrere Ausgleichsgeraden, aus denen sich die Halbwertszeit und die Anfangsaktivität ermitteln lassen. Die Halbwertszeiten werden mit den Literaturwerten der vermuteten Nuklide verglichen, die Anfangsaktivitäten dazu benutzt, das Anfangsinventar des Radionuklides in der Probe zu bestimmen. Damit kann man auch Anfangsaktivitäten von Nukliden bestimmen, die γ -Quanten gleicher Energie aussenden. Dazu ist das Programm Gamma Vision nicht fähig. Es kann Nuklide nur auf Grund der Energie ihrer γ -Quanten identifizieren, was bei Nukliden mit identischen γ -Linien zu falschen Anfangsaktivitäten führt.

Tabelle 21 auf Seite 59 zeigt ein Beispiel für die Bestimmung der Halbwertszeit und der Anfangszählrate. Dabei handelt es sich um die Nettozählraten für die 152,9 keV γ -Linie von ^{49}Cr aus der Bestrahlung der Probe Cr2. Die erste Spalte enthält die Zeit zwischen dem Ende der Bestrahlung und dem Beginn der Messung in Sekunden, die zweite die Nettozählraten in γ/s und die dritte Spalte den statistischen Fehler der Einzelmessung. An die logarithmierten Werte der Nettozählraten wird eine Ausgleichsgerade angepaßt, deren Steigung die Halbwertszeit ist. Sie beträgt hier 44 Minuten gegenüber einem Literaturwert von 42,1 Minuten. Der Y-Achsenabschnitt ist der Logarithmus der Anfangszählrate, aus der sich die Anfangsaktivität gemäß Abschnitt 5.2.3 zu $3,04 \times 10^6$ Bq errechnet. Dabei ist im vorliegenden Fall die Anfangszählrate 125 γ/s , die Nachweiswahrscheinlichkeit des Detektors bei 152,9 keV $1,3 \times 10^{-4}$, die Meßzeit 1 s und die relative Intensität der

γ -Linie 0,309. Das Anfangsinventar beträgt $1,11 \cdot 10^{10}$ Atome und ergibt sich aus der Anfangsaktivität durch Multiplikation mit der Halbwertszeit und Division durch $\ln(2) = 0,693$.

Zeit nach Ende der Bestrahlung [s]	Nettozählrate [γ/s]	statistischer Fehler der Nettozählrate [%]
565	101,79	3,21
799	98,39	2,66
1011	92,78	2,18
1263	98,70	1,61
1429	86,94	2,05
1581	89,115	1,29
1837	73,120	1,26
2088	70,715	1,24
2335	66,675	1,26
2580	61,690	1,32
2837	60,60	0,81
3513	44,62	0,88
4183	41,222	1,00
4851	34,893	1,05
5535	29,235	1,14

Tabelle 21. Beispiel zur Bestimmung der Halbwertszeit: Angegeben sind die Nettozählraten und die statistischen Fehler für die 152,9 keV γ -Linie von ^{49}Cr aus der Bestrahlung der Probe Cr2.

5.2.5 Statistische und systematische Fehler

Wie in Abschnitt 5.2.2 beschrieben ermittelt das Programm Gamma Vision für jeden Peak einen statistischen Fehler der Nettozählrate. Bei der Bestimmung der Halbwertszeit wird daraus ein mittlerer Fehler berechnet. Außerdem wird für jede Nettozählrate die Abweichung von der Ausgleichsgeraden bestimmt. Die Wurzel aus der Summe der Abweichungsquadrate gibt ein Maß für die Streuung der Meßwerte um die Ausgleichsgerade. Im Beispiel aus dem vorigen Abschnitt, der 152,9 keV γ -Linie von ^{49}Cr , ist der mittlere Fehler 1,5 %, die mittlere Abweichung von der Ausgleichsgeraden beträgt 4,9 %. Damit liegt der Literaturwert der Halbwertszeit von 42,1 Minuten innerhalb des Fehlerbereichs der errechneten Halbwertszeit von 44 Minuten.

Für die sehr kurzlebigen Isotope ^{51}Ti , ^{52}V , ^{53}V und ^{53}Fe führt die Änderung der Zerfallsrate während der Meßzeit zu einem systematischen Fehler. Bei der Bestimmung der Halbwertszeit wurden die Nettozählraten ohne den in Abschnitt 5.2.3 angegebenen Korrekturfaktor benutzt, da der Korrekturfaktor die Kenntnis der Halbwertszeit voraussetzt. Eine Abschätzung der Korrekturfaktoren für die genannten Isotope erfolgt in Abschnitt 5.4.2 beim Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den theoretischen Rechnungen.

Ein weiterer jedoch nur schwer zu fassender Fehler geht auf eine Eigentümlichkeit des Programms Gamma Vision zurück. Bei γ -Linien mit hoher Zählrate wird der Untergrund zu hoch abgeschätzt, was zu einer zu niedrigen Zählrate führt. Eine Korrektur konnte nicht vorgenommen werden.

5.3 Durchführung und Ergebnisse des Experiments

Das Experiment wurde während mehrerer Strahlzeiten durchgeführt (s. Tabelle 22 auf Seite 60). Die erste Strahlzeit diente vor allem dazu, zu testen, ob der Aufbau des Experimentes erfolgversprechend ist. Außerdem sollte an einem Beispiel die Richtigkeit der Überlegungen bezüglich der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen gezeigt werden. In den folgenden Strahlzeiten wurden jeweils mehrere Proben des gleichen Materials unterschiedlich lange bestrahlt und anschließend mit dem Germaniumdetektor untersucht. Um Radionuklide mit kurzer Halbwertszeit zu messen, wurden kurze Bestrahlungszeiten von 5 oder 10 Minuten gewählt, und die Proben nach dem Ende der Bestrahlung so schnell wie möglich zum Detektor gebracht. Für den Ausbau der Proben und den Transport zum Detektor wurden etwa 7 bis 10 Minuten benötigt. Die kürzesten, so bestimmbaren Halbwertszeiten betragen etwa 1,5 Minuten. Zum Nachweis von Radionukliden mit langen Halbwertszeiten wurden Bestrahlungszeiten von 90 Minuten und rund 40 Stunden gewählt. Die Proben wurden erst nach Abklingen der kurzlebigen Radionuklide zum Detektor gebracht.

Strahlzeit	Probenmaterial	Targetmaterial
9. - 14.6.91	Teflon	Kupfer
1. - 5.6.92	Vanadin	Beryllium
14. - 18.9.92	Eisen	Beryllium
19. - 23.10.92	Chrom	Beryllium

Tabelle 22. Strahlzeiten für das Experiment: mit Angabe von Target- und Probenmaterial.

Bei der ersten Bestrahlung wurde Teflon als Testmaterial wegen seines hohen Fluorgehalts ausgewählt, denn auf ein Kohlenstoffatom kommen zwei Fluoratome. Fluor ist interessant, weil die Aktivierungsrechnungen mit den Programmen PCROSS und FISPACT für Fluor einen extremen Zuwachs der γ -Dosisrate durch eine sequentielle Reaktion geladener Teilchen vorhersagten (vgl. Kap.4 Tabelle 7 auf Seite 25). Außerdem ist es als Bestandteil von FLiBe als Kühlmittel in der Diskussion. Der Zuwachs in der γ -Dosisrate beruht auf der Produktion des Nuklids ^{22}Na durch die (α, n) -Reaktion an ^{19}F , des einzigsten stabilen Fluor-Nuklids. Gelingt der Nachweis von ^{22}Na und stimmt das Ergebnis mit der Vorhersage überein, ist auch mit dem erfolgreichen Verlauf des weiteren Experimentes zu rechnen. Der Nachweis des ^{22}Na gelang und die Auswertung der Meßergebnisse lieferte ein Anfangsinventar von $4,7 \cdot 10^9$ ^{22}Na -Atomen. Die Vorhersage lieferte einen Wert von $18,5 \cdot 10^9$ ^{22}Na -Atomen, was einem Faktor von 3,9 ergibt und als hinreichende Übereinstimmung angesehen werden kann. Die Ursache für die Diskrepanz dürfte vor allem auf Seiten der Eingabedaten für die theoretische Rechnung zu suchen sein, denn die experimentellen Fehler liegen unter 20 %. Insbesondere die Vorhersage von unbekanntem Wirkungsquerschnitten bereitet immer wieder große Schwierigkeiten. Vergleiche von Rechnungen mit verschiedenen Kernmodellen und Computerprogrammen (z.B. [64]) weisen durchaus Abweichungen von einem Faktor 2 auf. Da der betrachtete Prozeß zweistufig ist - Produktion von α -Teilchen und deren Reaktion an ^{19}F - geht der Unsicherheitsfaktor zweimal in die Fehlerabschätzung ein. Deshalb liegt das Ergebnis immer noch innerhalb der Erwartungen. Die Ergebnisse der Bestrahlungen an Vanadin, Chrom und Eisen sind in den Tabellen der folgenden Abschnitte zusammengefaßt. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels wird noch einmal auf das Problem der Datenunsicherheit am Beispiel des Teflons eingegangen.

5.3.1 Ergebnisse der Bestrahlung von Vanadin

Wie in Kapitel 4.2 beschrieben, gehört Vanadin zu den Elementen, die als Basis neuer Legierungen in der Diskussion sind, deren Verhalten unter Neutronenbestrahlung bisher noch nicht ausreichend untersucht ist. Durch die Aktivierung von Vanadin sollten sowohl Wirkungsquerschnitte für neutroneninduzierte Reaktionen als auch für sequentielle Reaktionen geladener Teilchen überprüft werden. Tabelle 23 zeigt, welche Nuklide nach der Bestrahlung von Vanadin auf Grund ihrer γ -Strahlung nachgewiesen werden konnten.

				⁵² Mn		⁵⁴ Mn	⁵⁵ Mn
			⁵⁰ Cr	⁵¹ Cr	⁵² Cr	⁵³ Cr	⁵⁴ Cr
		⁴⁸V		<u>⁵⁰V</u>	<u>⁵¹V</u>	⁵²V	
	⁴⁶ Ti	⁴⁷ Ti	⁴⁸ Ti	⁴⁹ Ti	⁵⁰ Ti	⁵¹Ti	
⁴⁴ Sc	⁴⁵ Sc	⁴⁶Sc	⁴⁷Sc	⁴⁸Sc			
⁴³ Ca	⁴⁴ Ca		⁴⁶ Ca	⁴⁷Ca	⁴⁸ Ca		
	⁴³K	⁴⁴K					

Tabelle 23. Übersicht über die nachgewiesenen Nuklide für Vanadin: Nach der Bestrahlung von Vanadin konnten auf Grund Ihrer γ -Strahlung die fett gedruckten Nuklide nachgewiesen werden. Die unterstrichenen Nuklide sind die Ausgangsnuklide, die übrigen stabilen Nuklide dienen der Orientierung. Die Radionuklide ⁵³Mn, ⁴⁹V und ⁴⁵Ca konnten nicht nachgewiesen werden, da bei ihrem Zerfall keine γ -Strahlung entsteht.

Bei der Auswertung der Spektren wurden auch die Halbwertszeiten und das Anfangsinventar für jede γ -Energie bestimmt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 24 auf Seite 62 nach Nukliden geordnet und zusammengefaßt. Für die Probe V5 existieren zwei Spalten, weil bei der Aufnahme der Spektren zwei unterschiedliche Verstärkereinstellungen benutzt wurden, um festzustellen, ob auch oberhalb von 2500 keV noch γ -Linien gefunden würden. Dies war jedoch nicht der Fall.

Während der Auswertung zeigten sich einige Probleme. Zum einen erwies es sich als sehr schwierig, den Untergrund für die γ -Linien bei 159,4 keV für das Nuklid ⁴⁷Sc und bei 175,4 keV für das Nuklid ⁴⁸Sc zu ermitteln, da die Linien genau mit Compton-Kanten zusammenfielen. Zum anderen konnte die Funktion der Nachweiswahrscheinlichkeit für die Proben V2 und V3 bei niedrigen Energien nur näherungsweise bestimmt werden. Im Falle des Nuklids ⁴⁸Sc waren diese Probleme nicht so gravierend, da genügend andere γ -Linien ausgewertet werden konnten, anders dagegen beim Nuklid ⁴⁷Sc, das nur die eine γ -Linie bei 159,4 keV besitzt. Ein ähnliches Problem ergab sich für das Nuklid ⁴⁷Ca. Es besitzt ebenfalls nur eine starke γ -Linie bei 1297,1 keV. Da aber die Nuklide ⁴⁸Sc und ⁴⁸V beide eine starke γ -Linie bei 1312,1 keV besitzen, und das Inventar dieser beiden Nuklide wesentlich höher ist als das von ⁴⁷Ca, wurde die γ -Linie des ⁴⁷Ca überdeckt und konnte nicht ausgewertet werden.

Zu den Ergebnissen in Tabelle 24 auf Seite 62 wurden auch die statistischen Fehler bestimmt sie liegen alle unter 40 %, die meisten unter 10 %. Die höheren statistischen Fehler findet man im allgemeinen bei γ -Linien von geringer Intensität. Ursache für die geringe Intensität können sein die niedrige relative Häufigkeit der γ -Linie oder die lange Halbwertszeit des erzeugenden Nuklids. Da neben statistischen auch systematische Fehler auftreten können, wurden außer den Anfangsinventaren auch die Halbwertszeiten bestimmt, deren Vergleich mit Literaturwerten einen Hinweis auf systematische Fehler geben können. Zwei Beispiele aus den Ergebnissen für die Probe V4 sind ⁴⁶Sc, dessen Halbwertszeit fast doppelt so lang ist wie errechnet, was auf eine im Vergleich zur Halb-

wertszeit zu kurze Meßzeit zurückzuführen ist, und ^{51}Cr , dessen Halbwertszeit deutlich kürzer ist als errechnet. Insgesamt deuten die Abweichungen bei den Halbwertszeiten darauf hin, daß die Gesamtfehler etwa zweimal so groß sind wie die statistischen Fehler. Als letztes sei noch darauf hingewiesen, daß das Anfangsinventar für das Nuklid ^{54}Mn nur auf Grund einer Messung bestimmt wurde, die erst nach Abklingen der anderen Radionuklide erfolgte. Dieses Vorgehen war notwendig, da die Aktivität des Nuklids ^{54}Mn wegen der langen Halbwertszeit und des geringen Inventars zu gering war, um mit den anderen Nukliden gemessen zu werden. Deshalb ist für dieses Nuklid auch keine Halbwertszeit eingetragen.

Nuklid Halbwertszeit Literaturwert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe				
		V2 10 m 4,83 mC	V3 5 m 2,42 mC	V4 90 m 100,8 mC	V5 41,85 h 2,94 C	
^{43}K 22,3 h	372,8 keV 87,90 % 617,5 keV 78,30%				26 h $3,8 \cdot 10^{10}$	22 h $3,9 \cdot 10^{10}$
^{44}K 22,13 m	1157,0 keV 58,20 % 2150,8 keV 22,80%	24 m $1,0 \cdot 10^8$ 20 m $1,2 \cdot 10^8$		16 m $8,9 \cdot 10^8$		
$^{44\text{m}}\text{Sc}$ 58,56 h	271,2 keV 77,80 % 511,0 keV 185,70 % 1157,0 keV 108,30 %	68 h $1,2 \cdot 10^9$	55 h $5,6 \cdot 10^8$	68 h $5,6 \cdot 10^9$		
$^{46\text{g}}\text{Sc}$ 2012 h	889,2 keV 100,00 % 1120,5 keV 100,00 %			1200 h $3,7 \cdot 10^{11}$ 1100 h $3,8 \cdot 10^{11}$	2300 h $8,0 \cdot 10^{12}$ 2200 h $9,8 \cdot 10^{12}$	2300 h $8,1 \cdot 10^{12}$ 2200 h $9,8 \cdot 10^{12}$
^{47}Sc 80,16 h	159,4 keV 68,00 %	80 h $1,2 \cdot 10^{11}$	79 h $2,2 \cdot 10^{11}$	78 h $4,0 \cdot 10^{12}$	84 h $2,6 \cdot 10^{13}$	98 h $1,1 \cdot 10^{13}$
^{48}Sc 43,7 h	175,4 keV 7,47 % 983,5 keV 100,00 % 1037,5 keV 97,50 % 1212,8 keV 2,38 % 1312,1 keV 100,00 %	62 h $6,2 \cdot 10^{10}$ 45 h $6,3 \cdot 10^{10}$ 43 h $6,2 \cdot 10^{10}$ 61 h $4,2 \cdot 10^{10}$ 45 h $6,3 \cdot 10^{10}$	65 h $7,8 \cdot 10^{10}$ 43 h $3,7 \cdot 10^{10}$ 43 h $3,7 \cdot 10^{10}$ 44 h $2,8 \cdot 10^{10}$ 45 h $3,9 \cdot 10^{10}$	43 h $2,2 \cdot 10^{12}$ 44 h $1,1 \cdot 10^{12}$ 45 h $1,0 \cdot 10^{12}$ 45 h $9,4 \cdot 10^{11}$ 45 h $1,1 \cdot 10^{12}$	45 h $1,9 \cdot 10^{13}$ 42 h $2,1 \cdot 10^{13}$ 43 h $2,1 \cdot 10^{13}$ 45 h $2,1 \cdot 10^{13}$ 44 h $1,7 \cdot 10^{13}$ 43 h $1,9 \cdot 10^{13}$	45 h $1,6 \cdot 10^{13}$ 45 h $1,7 \cdot 10^{13}$ 48 h $1,4 \cdot 10^{13}$ 43 h $2,1 \cdot 10^{13}$
^{51}Ti 5,76 m	320,1 keV 93,00 % 608,5 keV 1,18 % 928,6 keV 6,88 %	6,1 m $4,2 \cdot 10^9$ 6,2 m $3,2 \cdot 10^{10}$ 6,1 m $3,9 \cdot 10^{10}$	5,1 m $1,0 \cdot 10^{11}$ 5,9 m $3,6 \cdot 10^{10}$ 5,9 m $3,5 \cdot 10^{10}$	6,0 m $8,3 \cdot 10^{10}$ 6,9 m $7,6 \cdot 10^{10}$ 5,6 m $9,8 \cdot 10^{10}$	5,6 m $7,0 \cdot 10^{10}$	4,8 m $9,8 \cdot 10^{10}$

Nuklid Halb- wertszeit Literatur- wert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe				
		V2 10 m 4,83 mC	V3 5 m 2,42 mC	V4 90 m 100,8 mC	V5 41,85 h 2,94 C	
⁴⁸ V 383,3 h	511,0 keV 100,80 %			380 h $1,6 \cdot 10^{11}$	380 h $3,5 \cdot 10^{12}$	390 h $3,5 \cdot 10^{12}$
	944,1 keV 7,76 %				470 h $2,6 \cdot 10^{12}$	
	983,5 keV 100,00 %			350 h $1,3 \cdot 10^{11}$	380 h $3,9 \cdot 10^{12}$	370 h $4,0 \cdot 10^{12}$
	1312,1 keV 97,50 %			350 h $1,4 \cdot 10^{11}$	380 h $3,8 \cdot 10^{12}$	360 h $4,3 \cdot 10^{12}$
⁵¹ Cr 664,8 h	2240,3 keV 2,41 %			300 h $1,9 \cdot 10^{11}$	340 h $3,4 \cdot 10^{12}$	370 h $3,3 \cdot 10^{12}$
	1333,6 keV 0,59 %					
⁵² V 3,75 m	1434,1 keV 100,00 %	3,8 m $4,3 \cdot 10^9$	3,9 m $3,2 \cdot 10^9$	3,8 m $7,7 \cdot 10^9$		
	1530,7 keV 0,12 %					
	320,1 keV 9,83 %			820 h $1,1 \cdot 10^{12}$	620 h $5,3 \cdot 10^{12}$	
^{52m} Mn 21,1 m	377,7 keV 1,68 %					
	511,0 keV 193,40 %	23 m $5,3 \cdot 10^7$	24 m $2,8 \cdot 10^7$			
	1434,1 keV 98,3 %					
⁵⁴ Mn 7500,0 h	834,8 keV 100,00 %				$9,7 \cdot 10^9$	

Tabelle 24. Ergebnisse der Bestrahlung von Vanadin: Unter der Probennummer sind angegeben die Bestrahlungsdauer und die gesamte Neutronenbelastung ausgedrückt durch die Ladung der erzeugenden Deuteronen. Es wurden keine Korrekturen vorgenommen. Die Daten in den ersten beiden Spalten sind dem γ -Strahlenkatalog von Reus und Westmeier entnommen [65].

5.3.2 Ergebnisse der Bestrahlung von Chrom

Chrom ist ein wichtiges Legierungselement sowohl für Vanadin als auch für Stähle. Deshalb ist es wichtig, auch hier gute Daten zur Verfügung zu haben. Tabelle 25 auf Seite 64 zeigt wieder im Überblick, welche Nuklide nach der Bestrahlung auf Grund ihrer γ -Strahlung nachgewiesen werden konnten.

In Tabelle 26 auf Seite 64 sind die Halbwertszeiten und das Anfangsinventar für die einzelnen γ -Linien nach Nukliden geordnet und zusammengestellt. Die Auswertung der Meßergebnisse bereitete bei Chrom weniger Probleme als bei Vanadin. Eine Schwierigkeit ergab sich aber für die Nuklide mit langen Halbwertszeiten bei den kurz bestrahlten Proben.

				⁵² Mn		⁵⁴ Mn	⁵⁵ Mn	⁵⁶ Mn
	⁴⁸ Cr	⁴⁹ Cr	<u>⁵⁰Cr</u>	⁵¹ Cr	<u>⁵²Cr</u>	<u>⁵³Cr</u>	<u>⁵⁴Cr</u>	
	⁴⁷ V	⁴⁸ V		⁵⁰ V	⁵¹ V	⁵² V	⁵³ V	
	⁴⁶ Ti	⁴⁷ Ti	⁴⁸ Ti	⁴⁹ Ti	⁵⁰ Ti	⁵¹ Ti		
⁴⁴ Sc	⁴⁵ Sc	⁴⁶ Sc	⁴⁷ Sc	⁴⁸ Sc				
⁴³ Ca	⁴⁴ Ca		⁴⁶ Ca		⁴⁸ Ca			
			⁴⁵ K					

Tabelle 25. Übersicht über die nachgewiesenen Nuklide für Chrom: Nach der Bestrahlung von Chrom konnten auf Grund Ihrer γ -Strahlung die fett gedruckten Nuklide nachgewiesen werden. Die unterstrichenen Nuklide sind die Ausgangsnuklide, die übrigen stabilen Nuklide dienen der Orientierung. Die Radionuklide ⁵³Mn, ⁴⁹V und ⁴⁵Ca konnten nicht nachgewiesen werden, da bei ihrem Zerfall keine γ -Strahlung entsteht.

Die Meßreihen waren zu kurz für eine korrekte Bestimmung der Halbwertszeit und des Anfangsinventars. Für die 320,1 keV-Linie, die von den Nukliden ⁵¹Ti und ⁵¹Cr erzeugt wird, war es deshalb schwierig die Anteile der beiden Nuklide an dieser Linie voneinander zu trennen. Für die Bestimmung des Nuklides ⁵¹Cr stand aber noch die lange Meßreihe nach der Bestrahlung der Probe Cr4 zur Verfügung. Die statistischen Fehler der angegebenen Werte liegen abgesehen von fünf Ausnahmen unter 30 % meist aber unter 10 %. In vier der fünf Ausnahmefälle handelt es sich um γ -Linien mit niedriger relativer Häufigkeit und bei ⁵⁴Mn ist die lange Halbwertszeit für die geringe Intensität der γ -Linie verantwortlich.

Nuklid Halbwertszeit Literaturwert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe			
		Cr1 5 m 5,4 mC	Cr2 5 m 2 mC	Cr3 90 m 54,2 mC	Cr4 45 h 2,79 C
⁴⁵ K 17,8 m	174,3 keV 75,30 % 1705,6 keV 53,30 %			21 m 5,6 * 10 ⁸	
^{44g} Sc 3,93 h	1157,0 keV 99,90 %			3,3 h 2,6 * 10 ⁸	2,2 h 2,1 * 10 ⁹
^{44m} Sc 58,56 h	271,2 keV 77,80 % 1157,0 keV 108,30 %			19,2 h 6,0 * 10 ⁸	62 h 9,0 * 10 ⁹
^{46g} Sc 2012 h	889,2 keV 100,00 % 1120,5 keV 100,00 %			449 h 2,2 * 10 ¹⁰ 193 h 3,7 * 10 ¹⁰	2400 h 9,2 * 10 ¹¹ 2400 h 9,6 * 10 ¹¹
⁴⁷ Sc 80,16 h	159,4 keV 68,00 %			80 h 3,0 * 10 ¹⁰	83 h 1,2 * 10 ¹²

Nuklid Halb- wertszeit Literatur- wert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe			
		Cr1 5 m 5,4 mC	Cr2 5 m 2 mC	Cr3 90 m 54,2 mC	Cr4 45 h 2,79 C
⁴⁸ Sc 43,7 h	175,4 keV 7,47 % 983,5 keV 100,00 % 1037,5 keV 97,50 % 1212,8 keV 2,38 % 1312,1 keV 100,00 %			42 h 2,9 * 10 ¹⁰ 66 h 3,5 * 10 ¹⁰ 44 h 2,4 * 10 ¹⁰ 27 h 2,8 * 10 ¹⁰ 70 h 3,4 * 10 ¹⁰	43 h 1,0 * 10 ¹² 41 h 7,9 * 10 ¹¹ 44 h 8,0 * 10 ¹¹ 46 h 7,1 * 10 ¹¹ 43 h 8,0 * 10 ¹¹
⁵¹ Ti 5,76 m	320,1 keV 93,00 % 928,6 keV 6,88 %	5,1 m 2,6 * 10 ⁹ 6,6 m 1,7 * 10 ⁹	5,9 m 1,2 * 10 ⁹ 6,4 m 1,2 * 10 ⁹		
⁴⁷ V 32,6 m	511,0 keV 193,00 %	31 m 2,3 * 10 ¹⁰	32 m 1,3 * 10 ¹⁰	32 m 1,1 * 10 ¹¹	54 m 8,5 * 10 ¹⁰
⁴⁸ V 383,3 h	511,0 keV 100,80 % 944,1 keV 7,76 % 983,5 keV 100,00 % 1312,1 keV 97,50 % 2240,3 keV 2,41 %			92 h 1,6 * 10 ¹¹	320 h 5,5 * 10 ¹² 410 h 4,6 * 10 ¹² 390 h 4,4 * 10 ¹² 390 h 4,6 * 10 ¹² 430 h 4,2 * 10 ¹²
⁵² V 3,75 m	1333,6 keV 0,59 % 1434,1 keV 100,00 % 1530,7 keV 0,12 %	3,4 m 2,0 * 10 ¹¹ 4,1 m 8,8 * 10 ¹⁰ 4,2 m 1,4 * 10 ¹¹	4,2 m 6,3 * 10 ¹⁰ 3,9 m 6,8 * 10 ¹⁰ 5,6 m 3,1 * 10 ¹⁰		
⁵³ V 1,61 m	1006,3 keV 89,6 % 1289,5 keV 10,00 %		2,2 m 5,6 * 10 ⁸		
⁴⁸ Cr 22,96 h	112,5 keV 95,00 % 308,3 keV 99,00 %			20 h 3,2 * 10 ⁹ 22 h 3,4 * 10 ⁹	23 h 7,4 * 10 ¹⁰ 29 h 7,2 * 10 ¹⁰
⁴⁹ Cr 42,1 m	62,3 keV 16,70 % 90,6 keV 54,20 % 152,9 keV 30,90 %	50 m 1,4 * 10 ¹⁰ 43 m 1,7 * 10 ¹⁰ 42 m 1,8 * 10 ¹⁰	45 m 8,7 * 10 ⁹ 40 m 1,1 * 10 ¹⁰ 44 m 1,1 * 10 ¹⁰	48 m 8,7 * 10 ¹⁰ 46 m 9,8 * 10 ¹⁰ 48 m 1,0 * 10 ¹¹	41 m 1,9 * 10 ¹¹ 42 m 1,8 * 10 ¹¹ 56 m 1,1 * 10 ¹¹

Nuklid Halb- wertszeit Literatur- wert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe				
		Cr1 5 m 5,4 mC	Cr2 5 m 2 mC	Cr3 90 m 54,2 mC	Cr4 45 h 2,79 C	
⁵¹ Cr 664,8 h	320,1 keV 9,83 %	2,4 h $2,4 \cdot 10^{12}$	4,7 h $1,3 \cdot 10^{12}$	780 h $1,9 \cdot 10^{13}$	700 h $8,7 \cdot 10^{14}$	
^{52g} Mn 134,2 h	346,0 keV 0,98 %				137 h $6,2 \cdot 10^{11}$	
	744,2 keV 90,00 %			127 h $2,2 \cdot 10^{10}$	136 h $9,8 \cdot 10^{11}$	
	848,2 keV 3,32 %			68 h $2,9 \cdot 10^{10}$	135 h $9,7 \cdot 10^{11}$	
	935,5 keV 94,50 %			117 h $2,5 \cdot 10^{10}$	136 h $1,1 \cdot 10^{12}$	
	1246,2 keV 4,59 %			66 h $2,5 \cdot 10^{10}$	142 h $9,1 \cdot 10^{11}$	
	1333,6 keV 5,07 %			138 h $3,6 \cdot 10^{10}$	146 h $9,5 \cdot 10^{11}$	
	1434,1 keV 100,00 %			121 h $2,3 \cdot 10^{10}$	135 h $1,0 \cdot 10^{12}$	
	^{52m} Mn 21,1 m	377,7 keV 1,68 %	16 m $8,6 \cdot 10^9$	21 m $4,0 \cdot 10^9$	21 m $1,6 \cdot 10^{10}$	
		1434,1 keV 98,3 %	20 m $5,8 \cdot 10^9$	21 m $3,1 \cdot 10^9$	16 m $3,3 \cdot 10^{10}$	
⁵⁴ Mn 7500,0 h	834,8 keV 100,00 %				2400 h $2,4 \cdot 10^{11}$	
⁵⁶ Mn 2,58 h	846,8 keV 98,90 %			1,4 h $7,0 \cdot 10^8$	4,4 h $1,6 \cdot 10^9$	
	1810,7 keV 27,20 %				2,1 h $2,9 \cdot 10^9$	
	2113,0 keV 14,30 %				1,6 h $4,2 \cdot 10^9$	

Tabelle 26. Ergebnisse der Bestrahlung von Chrom: Unter der Probennummer sind angegeben die Bestrahlungsdauer und die gesamte Neutronenbelastung ausgedrückt durch die Ladung der erzeugenden Deuteronen. Es wurden keine Korrekturen vorgenommen. Die Daten in den ersten beiden Spalten sind dem γ -Strahlenkatalog von Reus und Westmeier entnommen [65].

5.3.3 Ergebnisse der Bestrahlung von Eisen

Eisen ist der wichtigste metallische Werkstoff unserer Zeit. Deshalb gibt es zu Eisen auch eine Vielzahl von Untersuchungen. Daher hatte die Bestrahlung von Eisen in diesem Experiment weniger das Ziel, die Bibliotheksdaten zu überprüfen, sondern vielmehr umgekehrt mit Hilfe der vorhandenen Daten die Gültigkeit der experimentellen Ergebnisse zu bestätigen. Tabelle 27 auf Seite 67 gibt wieder einen Überblick über die nachgewiesenen Nuklide.

Die Halbwertszeiten und das Anfangsinventar, wie sie aus den Messungen der verschiedenen γ -Linien ermittelt wurden, sind nach Nukliden geordnet in Tabelle 28 auf

Seite 67 dargestellt. Schon während der Messungen zeigte sich, daß bei der Bestrahlung von Eisen, wie erwartet, deutlich mehr Radioaktivität erzeugt worden war.

				⁵⁵ Co	⁵⁶ Co	⁵⁷ Co	⁵⁸ Co	⁵⁹ Co	⁶⁰ Co
		⁵² Fe	⁵³ Fe	<u>⁵⁴Fe</u>		<u>⁵⁶Fe</u>	<u>⁵⁷Fe</u>	<u>⁵⁸Fe</u>	<u>⁵⁹Fe</u>
			⁵² Mn		⁵⁴ Mn	⁵⁵ Mn	⁵⁶ Mn		
	⁴⁹ Cr	⁵⁰ Cr	⁵¹ Cr	⁵² Cr	⁵³ Cr	⁵⁴ Cr			
	⁴⁸ V		⁵⁰ V	⁵¹ V	⁵² V				
⁴⁶ Ti	⁴⁷ Ti	⁴⁸ Ti	⁴⁹ Ti	⁵⁰ Ti					
⁴⁵ Sc			⁴⁸ Sc						

Tabelle 27. Übersicht über die nachgewiesenen Nuklide für Eisen: Nach der Bestrahlung von Eisen konnten auf Grund Ihrer γ -Strahlung die fett gedruckten Nuklide nachgewiesen werden. Die unterstrichenen Nuklide sind die Ausgangsnuklide, die übrigen stabilen Nuklide dienen der Orientierung. Die Radionuklide ⁵⁵Fe, ⁵³Mn, ⁴⁹V und ⁴⁵Ca konnten nicht nachgewiesen werden, da bei ihrem Zerfall keine γ -Strahlung entsteht. Die γ -Linien des Radionuklids ⁵⁹Fe bei 1099,3 keV und 1291,6 keV wurden zwar gesehen, die Zählraten waren für eine sinnvolle Auswertung jedoch zu niedrig.

Die Quellen sind vor allem die Nuklide ⁵⁶Mn und ⁵⁶Co, die durch Reaktionen am häufigsten Eisenisotop ⁵⁶Fe gebildet werden. Die hohe anfängliche Radioaktivität war auch der Grund dafür, daß das Nuklid ⁶⁰Co erst nachträglich in einer späteren Messung nach weitgehendem Abklingen der übrigen Aktivität nachgewiesen werden konnte. Die eventuell zu erwartenden Nickelisotope ⁵⁶Ni und ⁵⁷Ni konnten nicht nachgewiesen werden, da ihr Inventar für einen sofortigen Nachweis zu gering war, und ihre Halbwertszeiten nicht lang genug sind, um wie bei ⁶⁰Co das Abklingen der übrigen Aktivität abzuwarten. Das ebenfalls zu erwartende Isotop ⁵⁸Fe konnte gerade noch nachgewiesen werden. Die Intensität der γ -Linien war jedoch für eine sinnvolle Auswertung zu schwach. Auch bei diesen Ergebnissen liegen die statistischen Fehler mit Ausnahme von ^{53m}Fe alle unter 40 %, zumeist aber unter 10 %.

Nuklid Halb- wertszeit Literatur- wert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe				
		Fe2 5,5 m 6,16 mC	Fe3 5 m 5,80 mC	Fe4 90 m 104,5 mC	Fe5 41,27 h 2,72 C	Fe6 5 m 1,50 mC
⁴⁸ Sc 43,7 h	175,4 keV 7,47 % 983,5 keV 100,00 % 1037,5 keV 97,50 % 1212,8 keV 2,38 % 1312,1 keV 100,00 %				42 h 6,6 * 10 ⁹	
				31 h 1,9 * 10 ⁹	56 h 1,3 * 10 ¹⁰	

Nuklid Halb- wertszeit Literatur- wert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe				
		Fe2 5,5 m 6,16 mC	Fe3 5 m 5,80 mC	Fe4 90 m 104,5 mC	Fe5 41,27 h 2,72 C	Fe6 5 m 1,50 mC
⁴⁸ V 383,3 h	511,0 keV 100,80 % 944,1 keV 7,76 % 983,5 keV 100,00 % 1312,1 keV 97,50 % 2240,3 keV 2,41 %				390 h 7,0 * 10 ¹⁰ 690 h 4,6 * 10 ¹⁰	
⁵² V 3,75 m	1333,6 keV 0,59 % 1434,1 keV 100,00 % 1530,7 keV 0,12 %					3,1 m 7,47 * 10 ⁸
⁴⁹ Cr 42,1 m	62,3 keV 16,70 % 90,6 keV 54,20 % 152,9 keV 30,90 %	31 m 5,3 * 10 ⁸	27 m 1,2 * 10 ⁹			
⁵¹ Cr 664,8 h	320,1 9,83 %				660 h 2,9 * 10 ¹³	
^{52g} Mn 134,2 h	346,0 keV 0,98 % 399,6 keV 0,18 % 600,1 keV 0,39 % 647,5 keV 0,40 % 744,2 keV 90,00 % 848,2 keV 3,32 % 935,5 keV 94,50 % 1246,2 keV 4,59 % 1333,6 keV 5,07 % 1434,1 keV 100,00 %			135 h 1,6 * 10 ¹¹ 122 h 1,8 * 10 ¹¹ 101 h 1,8 * 10 ¹¹ 73 h 2,2 * 10 ¹¹	145 h 4,3 * 10 ¹² 134 h 6,2 * 10 ¹² 159 h 4,6 * 10 ¹² 150 h 4,9 * 10 ¹² 131 h 4,9 * 10 ¹² 137 h 4,7 * 10 ¹² 134 h 5,0 * 10 ¹² 143 h 4,4 * 10 ¹² 140 h 4,3 * 10 ¹²	

Nuklid Halb- wertszeit Literatur- wert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe				
		Fe2 5,5 m 6,16 mC	Fe3 5 m 5,80 mC	Fe4 90 m 104,5 mC	Fe5 41,27 h 2,72 C	Fe6 5 m 1,50 mC
^{52m} Mn 21,1 m	377,7 keV 1,68 % 1434,1 keV 98,3 %	21 m 8,1 * 10 ⁹	20 m 5,5 * 10 ⁹	24 m 2,1 * 10 ¹⁰		20 m 2,2 * 10 ⁹
⁵⁴ Mn 7500,0 h	834,8 keV 100,00 %			2100 h 7,7 * 10 ¹²	8100 h 2,2 * 10 ¹⁴	
⁵⁶ Mn 2,58 h	846,8 keV 98,90 % 1810,7 keV 27,20 % 2113,0 keV 14,30 % 2522,9 keV 0,99 % 2657,5 keV 0,65 % 2959,8 keV 0,31 % 3369,6 keV 0,17 %	2,1 h 4,2 * 10 ¹¹ 2,5 h 4,3 * 10 ¹¹	2,3 h 3,8 * 10 ¹¹ 2,9 h 3,9 * 10 ¹¹ 2,7 h 4,0 * 10 ¹¹ 3,1 h 4,4 * 10 ¹¹ 3,1 h 4,5 * 10 ¹¹ 1,5 h 5,7 * 10 ¹¹ 3,0 h 5,6 * 10 ¹¹	2,5 h 6,5 * 10 ¹² 2,6 h 5,9 * 10 ¹² 2,6 h 6,2 * 10 ¹² 2,6 h 6,9 * 10 ¹² 2,5 h 8,6 * 10 ¹² 2,4 h 9,5 * 10 ¹² 2,2 h 8,6 * 10 ¹²		3,1 h 1,1 * 10 ¹¹ 2,9 h 1,1 * 10 ¹¹ 3,0 h 1,1 * 10 ¹¹ 2,5 h 1,2 * 10 ¹¹
⁵⁸ Fe 8,27 h	168,7 keV 99,20 % 1434,1 keV 102,70 %			7,5 h 5,2 * 10 ⁹	8,7 h 3,3 * 10 ¹⁰	
⁵⁹ Fe 8,51 m	377,9 keV 40,00 %	9,1 m 1,2 * 10 ¹⁰	9,9 m 9,4 * 10 ⁹			8,7 m 3,7 * 10 ⁹
^{53m} Fe 2,58 m	701,1 keV 98,60 % 1011,5 keV 84,80 % 1328,1 keV 85,80 % 2339,6 keV 14,00 %					2,4 m 9,6 * 10 ⁷ 2,6 m 4,8 * 10 ⁷
⁵⁵ Co 17,54 h	91,8 keV 2,70 % 477,2 keV 20,30 % 931,5 keV 75,00 % 1316,7 keV 7,10 % 1370,0 keV 3,00 % 1408,7 keV 16,50 %			16 h 2,1 * 10 ¹⁰ 20 h 1,6 * 10 ¹⁰ 15 h 1,8 * 10 ¹⁰ 15 h 3,7 * 10 ¹⁰ 17 h 1,7 * 10 ¹⁰	26 h 1,9 * 10 ¹¹ 21 h 4,0 * 10 ¹¹ 16 h 5,9 * 10 ¹¹ 21 h 4,4 * 10 ¹¹ 21 h 4,1 * 10 ¹¹ 18 h 4,9 * 10 ¹¹	

Nuklid Halb- wertszeit Literatur- wert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe				
		Fe2 5,5 m 6,16 mC	Fe3 5 m 5,80 mC	Fe4 90 m 104,5 mC	Fe5 41,27 h 2,72 C	Fe6 5 m 1,50 mC
⁵⁶ Co 1891 h	846,8 keV 99,90 %			10 h 3,5 * 10 ¹¹	1700 h 1,1 * 10 ¹³	
	977,4 keV 1,40 %				2000 h 1,3 * 10 ¹³	
	1037,8 keV 14,10 %				1800 h 1,1 * 10 ¹³	
	1175,1 keV 2,26 %				1800 h 1,2 * 10 ¹³	
	1238,3 keV 67,00 %				1800 h 1,2 * 10 ¹³	
	1360,2 keV 4,29 %				1700 h 1,1 * 10 ¹³	
	1771,4 keV 15,50 %				1900 h 1,1 * 10 ¹³	
	1810,7 keV 0,65 %				1600 h 1,2 * 10 ¹³	
	1963,8 keV 0,70 %				2200 h 1,1 * 10 ¹³	
	2015,4 keV 3,03 %				1700 h 1,1 * 10 ¹³	
	2034,9 keV 7,78 %				1800 h 1,1 * 10 ¹³	
	2598,6 keV 16,80 %				1900 h 1,2 * 10 ¹³	
	3009,7 keV 1,03 %				1800 h 1,2 * 10 ¹³	
	3202,2 keV 3,02 %				1800 h 1,3 * 10 ¹³	
	3253,5 keV 7,40 %				1800 h 1,3 * 10 ¹³	
	3273,2 keV 1,73 %				1900 h 1,3 * 10 ¹³	
	3451,4 keV 0,89 %				1800 h 1,3 * 10 ¹³	
	3548,1 keV 0,17 %				1700 h 1,6 * 10 ¹³	

Nuklid Halb- wertszeit Literatur- wert	γ -Linie Energie relative Häufigkeit	Halbwertszeit und Anfangsinventar berechnet aus Probe				
		Fe2 5,5 m 6,16 mC	Fe3 5 m 5,80 mC	Fe4 90 m 104,5 mC	Fe5 41,27 h 2,72 C	Fe6 5 m 1,50 mC
⁵⁷ Co 6523 h	122,1 keV 85,60 % 136,5 keV 10,60 %				6500 h 3,3 * 10 ¹² 7800 h 3,2 * 10 ¹²	
^{58g} Co 1702 h	810,8 keV 99,40 %				1900 h 1,6 * 10 ¹¹	
^{60g} Co 46200 h	1173,2 keV 99,90 % 1332,5 keV 100,00 %				3.6 * 10 ⁹ 4.5 * 10 ⁹	

Tabelle 28. Ergebnisse der Bestrahlung von Eisen: Unter der Probennummer sind angegeben die Bestrahlungsdauer und die gesamte Neutronenbelastung ausgedrückt durch die Ladung der erzeugenden Deuteronen. Es wurden keine Korrekturen vorgenommen. Die Daten in den ersten beiden Spalten sind dem γ -Strahlenkatalog von Reus und Westmeier entnommen [65].

5.4 Vergleich des experimentellen mit dem rechnerisch bestimmten Anfangsinventar.

Da die experimentellen Ergebnisse dazu dienen sollen, die Daten der EAF-Bibliothek und der KFK-Bibliotheken zu überprüfen, wurde das zu erwartende Anfangsinventar in den Proben mit den Programmen PCROSS und FISPACT berechnet. Dazu war es notwendig, die Daten der EAF-Bibliothek, die nur bis 20 MeV reichen, bis 60 MeV zu erweitern. Die benötigten Wirkungsquerschnitte wurden mit dem Programm ALICE berechnet und bei 15 MeV an die Daten der EAF-Bibliothek angepaßt, sofern die EAF-Bibliothek für die betreffenden Reaktionen Daten enthält. Eine Ausnahme bilden die Wirkungsquerschnitte für die (n, γ)-Reaktionen. Sie wurden oberhalb 20 MeV als konstant angenommen. Dieses Verfahren erscheint gerechtfertigt, da die meisten (n, γ)-Wirkungsquerschnitte oberhalb von ein paar MeV stark abfallen und bei 20 MeV schon auf sehr kleine Werte abgesunken sind, sodaß sie bei höheren Energien keine Rolle mehr spielen. Weiter wird für die Rechnungen ein Neutronenspektrum benötigt.

5.4.1 Berechnung des Neutronenspektrums

Die Energieverteilung und der Fluß der im Target entstehenden Neutronen wurde in diesem Experiment nicht gemessen, statt dessen wurde auf ältere Daten zurückgegriffen. Sie stammen von G. Schweimer [66] und wurden ebenfalls am Karlsruher Isochron Zyklotron mittels Flugzeitmessungen ermittelt. Sie umfassen jedoch nur den Energiebereich zwischen 12 MeV und 44 MeV für Beryllium (vgl. Abbildung 19 auf Seite 72). Um ein vollständiges Spektrum zu erhalten, wurde deshalb folgender Weg beschritten:

Bei der Entstehung der Neutronen spielen vor allem zwei Reaktionsmechanismen eine wichtige Rolle. Zum einen werden auftreffende Deuteronen in den Kernen des Targetmaterials eingefangen. Die Energie der Deuteronen verteilt sich dabei über den gesamten Kern, bis durch einen Verdampfung genannten Prozeß Nukleonen, also Protonen oder Neutronen, ausgestoßen werden. Dieser Reaktionsmechanismus kann mittels stati-

stischer Kernmodelle ziemlich zuverlässig beschrieben werden. Hierzu wurde erneut das Program ALICE verwendet. Aus den so berechneten Wirkungsquerschnitten und den differentiellen Reichweiten der Deuteronen wurde der Verdampfungsanteil des Neutronenspektrums errechnet. Dieser Teil des Spektrums wurde lediglich mit dem jeweils aktuellen Deuteronenstrom skaliert.

Daneben findet ein weiterer Reaktionsmechanismus statt. Die Deuteronen dringen in den Kernbereich der Atome des Targetmaterials ein und werden hier von Coulomb- und Kernkräften auseinandergerissen. Dabei können ein oder beide Nukleonen des Deuteronen entkommen. Um dies zu beschreiben wird folgender Ansatz benutzt:

$$N_n(E) = 0,3535 A \left(1 + \frac{(E - E_d)^2}{E_d B} \right)^{-3/2} \quad (5.4)$$

$N_n(E)$ ist die Zahl der Neutronen mit der Energie E , B die Bindungsenergie (2,23 MeV) und E_d die effektive Energie der Deuteronen. Letztere ist etwas geringer als die tatsächliche Auftreffenergie der Deuteronen auf das Target, da die Deuteronen auf ihrem Weg durch das Target abgebremst werden. E ist die Energie der auslaufenden Neutronen. Im Gegensatz zum Verdampfungsanteil des Neutronenspektrums, der isotrop ist, ist der zuletzt beschriebene Mechanismus richtungsabhängig; die Neutronen gehen bevorzugt in Vorwärtsrichtung. Um die Winkelabhängigkeit entsprechend dem experimentellen Aufbau zu berücksichtigen, wird mit dem Faktor 0,3535 multipliziert. Der Faktor ist das Verhältnis aus der Integration über die Winkelabhängigkeit des Neutronenflusses im Experiment durch die Integration für den Fall eines isotropen Neutronenflusses. Nach Addition des Verdampfungsanteils werden die Parameter A und E_d so angepaßt, daß sie die gemessenen Daten von Schweimer möglichst gut wiedergeben (vgl. Abbildung 19). Die Abweichung der so errechneten Daten von den gemessenen beträgt weniger als 10 %. Außerhalb des gemessenen Bereichs bestehen naturgemäß größere Unsicherheiten. Insbesondere wurde die Funktion 5.4 bei der maximalen Auftreffenergie abgebrochen ($E = 54$ MeV). Da die mit dem so erstellten Neutronenspektrum ausgeführten Rechnungen gute Ergebnisse liefern, kann das Verfahren als gerechtfertigt gelten, zumal es sich im entscheidenden Energiebereich auf gemessene Daten stützt.

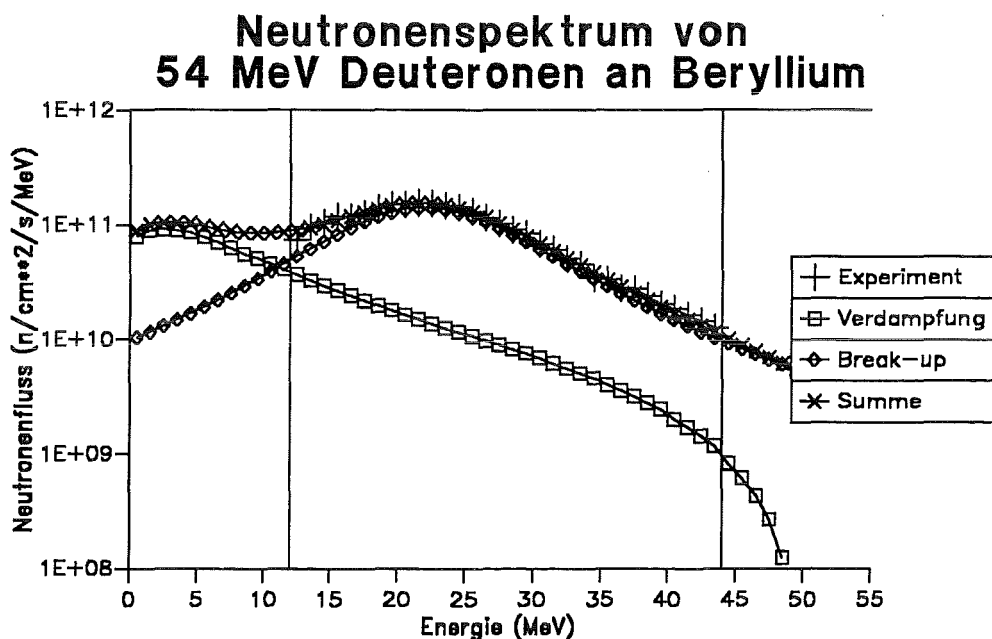


Abbildung 19. Neutronenspektrum von 54 MeV Deuteronen an Beryllium: Die senkrechten Linien begrenzen den Bereich mit experimentellen Daten.

5.4.2 Vergleich der Ergebnisse

Mit dem eben beschriebenen Neutronenspektrum und den mit ALICE berechneten und soweit möglich mit Hilfe der EAF-Bibliothek renormierten Wirkungsquerschnitten wurde durch die Programme PCROSS und FISPACT das zu erwartende Anfangsinventar in den bestrahlten Proben errechnet. Die Ergebnisse sind in den Tabellen dieses Abschnitts dargestellt. Um den Vergleich zu erleichtern, enthalten die Tabellen auch für jedes Nuklid den Mittelwert des aus den zugehörigen γ -Linien bestimmten Anfangsinventars aus Tabelle 24 auf Seite 62, Tabelle 26 auf Seite 64 und Tabelle 28 auf Seite 67. Darüberhinaus wurden auch die Produktionspfade für die einzelnen Nuklide analysiert. Dabei zeigte sich, daß von den nachgewiesenen Nukliden alle durch neutroneninduzierte Reaktionen erzeugten Nuklide durch einstufige Prozesse gebildet werden. Nur die durch sequentielle Reaktionen geladener Teilchen erzeugten Nuklide werden durch zweistufige Prozesse gebildet. Ursache für den Befund, daß auch Nuklide wie ^{49}K bei der Bestrahlung von Vanadin in einem einstufigen Prozess gebildet werden, ist die im Vergleich zum Fusionspektrum wesentlich höhere maximale Neutronenenergie von 54 MeV. Die EAF-Bibliothek enthält aber nur Wirkungsquerschnitte für Reaktionen mit Schwellen unter 20 MeV. Nuklide wie ^{49}K sind deshalb für den Vergleich uninteressant. Unter einem anderen Gesichtspunkt sind aber auch sie von Bedeutung. Bei der geplanten intensiven Neutronenquelle für die Materialentwicklung in der Fusion (IFMIF) werden die Neutronen durch die Reaktion von 35 MeV Deuteronen an Lithium erzeugt. Da ein Teil der dabei auftretenden Reaktionen exotherm ist, ist die Energieverteilung der entstehenden Neutronen der in diesem Experiment ähnlich. Deshalb werden auch einige Probleme bei der Interpretation der Ergebnisse einander ähnlich sein, wie zum Beispiel das Auftreten zusätzlicher Reaktionen, oder die zunehmende Bedeutung der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen bei höherer Neutronenenergie.

In Tabelle 29 auf Seite 74 werden die Ergebnisse für das Vanadin einander gegenübergestellt. Die EAF-Bibliothek enthält Wirkungsquerschnitte für die Produktion der Nuklide ^{46}Sc , ^{47}Sc , ^{48}Sc , ^{51}Ti und ^{52}V . Aus der Pfadanalyse geht allerdings hervor, daß der für die Produktion des Nuklids ^{46}Sc in diesem Experiment verantwortliche Wirkungsquerschnitt in der EAF-Bibliothek nicht enthalten ist. Die EAF-Bibliothek enthält die Reaktion $^{50}\text{V}(n, n'\alpha)$, die dominante Reaktion ist jedoch $^{51}\text{V}(n, 2n\alpha)$. Ein Vergleich ist also auch für dieses Nuklid nicht möglich.

Wie schon in Abschnitt 5.3.1 beschrieben, gab es bei der Auswertung der Meßergebnisse für das Nuklid ^{47}Sc einige Schwierigkeiten. Das Ergebnis für die Probe V3 ist offensichtlich fehlerbehaftet. Am ehesten zutreffend ist wohl das Ergebnis für die Probe V5. Sie wurde lange bestrahlt und über einen entsprechend langen Zeitraum ausgemessen, sodaß sich genügend Daten auch für die Bestimmung eines Nuklids mit langer Halbwertszeit ergaben. Auf Grund der Schwierigkeiten bei der Auswertung ist es kaum möglich eine Schlußfolgerung aus dem Ergebnis zu ziehen, zumal der für die Rechnung benutzte Wirkungsquerschnitt aus der Datensammlung ENDF/B-6 in die EAF-Bibliothek übernommen wurde, und zu den Wirkungsquerschnitten mit geringerer Unsicherheit gehört.

Für das Nuklid ^{48}Sc stimmen die experimentellen und rechnerischen Ergebnisse im Rahmen der experimentellen Genauigkeit überein mit der Folgerung, daß der Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $^{51}\text{V}(n, \alpha)$ entsprechend richtig ist. Dieses Ergebnis entspricht auch der Tatsache, daß der in der EAF-Bibliothek enthaltene Wirkungsquerschnitt mit Hilfe experimenteller Daten renormiert wurde.

Schon in Abschnitt 5.2.5 wurde darauf hingewiesen, daß sich aus der im Vergleich zur Meßzeit kurzen Halbwertszeit des Nuklids ^{51}Ti ein systematischer Fehler ergibt. Die Korrekturfaktoren für die Ergebnisse der Proben V2 bis V5 betragen 1,3, 1,2, 1,6 und 2,5, so daß im Rahmen der experimentellen Genauigkeit Übereinstimmung mit den errechneten

Werten erreicht wird. Dies steht im Einklang mit der Tatsache, daß der in der EAF-Bibliothek enthaltene Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $^{51}\text{V}(n,p)$ an Hand experimenteller Daten renormiert wurde.

Für das Nuklid ^{52}V reichen die Korrekturfaktoren (1,5, 1,4 und 2,0 für die Proben V2 bis V4) nicht um die Abweichung zu erklären. Der Grund dafür könnte eine zu hohe Abschätzung des Wirkungsquerschnittes für die Reaktion $^{51}\text{V}(n,\gamma)$ oberhalb 20 MeV sein. Die Werte unterhalb 20 MeV wurden nämlich aus der Bibliothek JENDL-3 in die EAF-Bibliothek übernommen und haben nur eine geringe Unsicherheit.

Das Nuklid ^{51}Cr wird durch eine sequentielle Reaktion von Protonen erzeugt. Schon in Abschnitt 5.3.1 wurde darauf hingewiesen, daß das experimentelle Ergebnis für die Probe V4 falsch ist. Die Differenz im Ergebnis der Probe V5 ist dagegen nicht auf einen Meß- oder Auswertefehler zurückzuführen. Als Ursache kommen zwei andere Möglichkeiten in Betracht. Entweder werden mehr Protonen erzeugt, als die Wirkungsquerschnitte aussagen, oder der Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $^{51}\text{V}(p,n)$ wurde zu niedrig angesetzt. Was die erste Möglichkeit betrifft, so führt die EAF-Bibliothek für die Produktion von Protonen in Vanadin als wichtigste die zwei Wirkungsquerschnitte $^{51}\text{V}(n,p)$ und $^{51}\text{V}(n,n'p)$ auf. Wie oben erläutert ist der erste der beiden Wirkungsquerschnitte trotz der Abweichungen im Ergebnis für das Nuklid ^{51}Ti wahrscheinlich richtig. Die Reaktion des zweiten Wirkungsquerschnitts führt zu einem stabilen Nuklid und konnte in diesem Experiment nicht überprüft werden. Der Wirkungsquerschnitt wurde aus der Datensammlung ENDF/B-6 in die EAF-Bibliothek übernommen und ist rund dreimal so groß wie der erste Wirkungsquerschnitt, liefert also den größten Teil der Protonen. Mindestens ebenso groß ist die Unsicherheit für den Wirkungsquerschnitt der (p,n)-Reaktion, der mit ALICE berechnet wurde.

Für das Nuklid ^{52}Mn konnte nur der angeregte Zustand nachgewiesen werden. Das Programm ALICE berechnet jedoch keine Wirkungsquerschnitte für angeregte Zustände und Daten über Verzweigungsverhältnisse liegen ebenfalls keine vor.

Das Nuklid ^{54}Mn wird durch die Reaktion von α -Teilchen an ^{51}V erzeugt. Die wichtigsten Quellen für die α -Teilchen sind die Reaktionen (n, α) und (n,n' α) an ^{51}V , die zu den Nukliden ^{47}Sc und ^{48}Sc führen. Die Ergebnisse stimmen im Rahmen der Meßgenauigkeit überein. Dies steht im Einklang mit den Ergebnissen für das Nuklid ^{48}Sc und bestätigt noch einmal, daß die experimentellen Ergebnisse für das Nuklid ^{47}Sc fehlerbehaftet sind, während die rechnerischen Ergebnisse möglicherweise stimmen.

Isotop	V2	V3	V4	V5
^{43}K				$3,88 \cdot 10^{10}$ (2) $2,19 \cdot 10^{10}$
^{44}K	$1,10 \cdot 10^8$ (2) $6,51 \cdot 10^7$		$8,91 \cdot 10^8$ (1) $5,26 \cdot 10^8$	
^{44g}Sc	$2,51 \cdot 10^6$	$1,26 \cdot 10^6$	$4,64 \cdot 10^7$	
^{44m}Sc	$1,17 \cdot 10^9$ (1)	$5,62 \cdot 10^8$ (1)	$5,61 \cdot 10^9$ (1)	
^{46g}Sc			$3,76 \cdot 10^{11}$ (2) $2,82 \cdot 10^{11}$	$8,91 \cdot 10^{12}$ (2+2) $8,15 \cdot 10^{12}$
^{47}Sc	$1,22 \cdot 10^{11}$ (1) $1,97 \cdot 10^{11}$	$2,22 \cdot 10^{11}$ (1) $9,85 \cdot 10^{10}$	$4,03 \cdot 10^{12}$ (1) $4,07 \cdot 10^{12}$	$1,87 \cdot 10^{13}$ (1+1) $1,00 \cdot 10^{14}$
^{48}Sc	$5,86 \cdot 10^{10}$ (5) $4,87 \cdot 10^{10}$	$3,51 \cdot 10^{10}$ (4) $2,43 \cdot 10^{10}$	$1,26 \cdot 10^{12}$ (5) $1,00 \cdot 10^{12}$	$1,83 \cdot 10^{13}$ (5+4) $2,15 \cdot 10^{13}$

Isotop	V2	V3	V4	V5
⁵¹ Ti	3,58 * 10 ¹⁰ (2) 7,57 * 10 ¹⁰	3,57 * 10 ¹⁰ (2) 4,89 * 10 ¹⁰	8,56 * 10 ¹⁰ (3) 2,50 * 10 ¹¹	8,38 * 10 ¹⁰ (2) 2,61 * 10 ¹¹
⁴⁸ V			1,54 * 10 ¹¹ (4) 4,06 * 10 ¹¹	3,59 * 10 ¹² (5+4) 1,14 * 10 ¹³
⁵² V	4,28 * 10 ⁹ (1) 1,44 * 10 ¹⁰	3,15 * 10 ⁹ (1) 1,03 * 10 ¹⁰	7,68 * 10 ⁹ (1) 3,95 * 10 ¹⁰	
⁵¹ Cr			1,07 * 10 ¹² (1) 8,53 * 10 ⁹	5,33 * 10 ¹² (1) 2,43 * 10 ¹¹
^{52g} Mn	1,35 * 10 ³	674		
^{52m} Mn	5,30 * 10 ⁷ (1)	2,84 * 10 ⁷ (1)		
⁵⁴ Mn				9,68 * 10 ⁹ (1) 8,10 * 10 ⁹

Tabelle 29. Radioaktives Inventar in Vanadin: berechnet mit Hilfe der Computerprogramme ALICE, PCROSS und FISPACT für das Ende der Bestrahlung. Der erste Wert ergibt sich als Mittelwert der in Tabelle 24 auf Seite 62 angegebenen Werte. Der zweite Wert ist der errechnete.

Die Ergebnisse für das Chrom sind in Tabelle 30 auf Seite 76 zusammengestellt. Die EAF-Bibliothek enthält Wirkungsquerschnitte für die Produktion der Nuklide ⁵¹Ti, ⁴⁸V, ⁵²V, ⁵³V, ⁴⁹Cr und ⁵¹Cr. Für die Produktion des Nuklids ⁵¹Ti ist der wichtigste Wirkungsquerschnitt der für die Reaktion ⁵²Cr(n,2p). Der in der EAF-Bibliothek angegebene Wirkungsquerschnitt, der mit dem Programm THRESH errechnet wurde, ist zu groß. Denn auch wenn man berücksichtigt, daß die Messung einen Fehler in der Größe eines Faktors 1,4 enthält wegen der kurzen Halbwertszeit des Nuklids, bleibt eine Diskrepanz zwischen gemessenem und errechnetem Ergebnis von einer Größenordnung.

Die Ergebnisse für das Nuklid ⁴⁸V stimmen im Rahmen der Meßgenauigkeit überein. Damit dürften auch die Wirkungsquerschnitte für die Reaktionen ⁵⁰Cr(n,n'd) und ⁵⁰Cr(n,t) aus der EAF-Bibliothek richtig sein, wobei der erste mit dem Programm THRESH bestimmt und der zweite an Hand von experimentellen Daten renormiert wurde.

Wenn man für das Nuklid ⁵²V denselben Fehlerfaktor in Betracht zieht wie in den anderen Fällen kurzlebiger Isotope, dann kann auch hier von Übereinstimmung gesprochen werden. An der Produktion des Nuklids sind im wesentlichen drei Reaktionen beteiligt ⁵²Cr(n,p), ⁵³Cr(n,n'p) und ⁵³Cr(n,d). Die Wirkungsquerschnitte für diese drei Reaktionen in der EAF-Bibliothek wurden mit Hilfe experimenteller Daten renormiert. Dies stützt die Annahme, daß die Diskrepanz zwischen gemessenem und errechnetem Inventar auf einem systematischen Meßfehler beruht.

Für die Abweichung beim Nuklid ⁵³V reicht die Kurzlebigkeit des Nuklids als Erklärung nicht aus (Korrekturfaktor 2,5). Von den drei an der Produktion beteiligten Reaktionen ⁵³Cr(n,p), ⁵⁴Cr(n,n'p) und ⁵⁴Cr(n,d) wurden die Wirkungsquerschnitte für die letzten beiden, die den größten Teil zur Produktion beitragen, möglicherweise überschätzt, und das, obwohl alle Wirkungsquerschnitte für die EAF-Bibliothek mittels experimenteller Werte renormiert wurden.

Der EAF-Wirkungsquerschnitt für die Produktion des Nuklids ⁴⁹Cr ⁵⁰Cr(n,2n), der mit experimentellen Daten renormiert wurde, ist dagegen richtig, wie die Übereinstimmung zwischen experimentellem und rechnerischem Ergebnis zeigt. Der für die Produktion von

^{49}Cr in diesem Experiment ebenfalls wichtige Wirkungsquerschnitt der Reaktion $^{52}\text{Cr}(n,4n)$ hat eine Schwelle von über 20 MeV und ist deshalb nicht in der EAF-Bibliothek enthalten.

Übereinstimmung findet man auch für das Nuklid ^{51}Cr und damit Bestätigung für den Produktionswirkungsquerschnitt $^{52}\text{Cr}(n,2n)$, der für die EAF-Bibliothek aus der Bibliothek IRDF-90 übernommen wurde.

Die Ergebnisse für das Inventar des Nuklids ^{52}Mn im Grundzustand zeigen Übereinstimmung im Rahmen der Meßgenauigkeit. Aussagen zum Ergebnis für den angeregten Zustand sind dagegen nicht möglich.

Das zu gering berechnete Inventar für das Nuklid ^{54}Mn weist darauf hin, daß hier eine Reaktion nicht berücksichtigt werden konnte. Es handelt sich um die Reaktion $^{52}\text{Cr}(t,n)$. Das Problem liegt darin, daß das Programm ALICE keine Wirkungsquerschnitte und keine Spektren für die Produktion von Tritonen liefert.

Das selbe Problem nur mit noch drastischeren Auswirkungen findet sich bei der Bestimmung des Inventars für das Nuklid ^{56}Mn . Hier ist die $^{54}\text{Cr}(t,n)$ -Reaktion die mit Abstand wichtigste für die Produktion dieses Nuklids.

Isotop	Cr1	Cr2	Cr3	Cr4
^{45}K			$5,56 \cdot 10^8$ (1) $3,80 \cdot 10^4$	
^{44g}Sc			$2,64 \cdot 10^8$ (1) $2,57 \cdot 10^8$	$2,05 \cdot 10^9$ (1) $1,90 \cdot 10^9$
^{44m}Sc			$5,98 \cdot 10^8$ (1)	$9,00 \cdot 10^9$ (1)
^{46g}Sc			$2,93 \cdot 10^{10}$ (2) $1,31 \cdot 10^{10}$	$9,39 \cdot 10^{11}$ (2) $6,69 \cdot 10^{11}$
^{47}Sc			$2,96 \cdot 10^{10}$ (1) $2,29 \cdot 10^{10}$	$1,19 \cdot 10^{12}$ (1) $9,88 \cdot 10^{11}$
^{48}Sc			$3,00 \cdot 10^{10}$ (5) $3,19 \cdot 10^{10}$	$7,73 \cdot 10^{11}$ (4) $1,19 \cdot 10^{12}$
^{51}Ti	$2,18 \cdot 10^9$ (2) $7,66 \cdot 10^{10}$	$1,20 \cdot 10^9$ (2) $2,85 \cdot 10^{10}$		
^{47}V	$2,28 \cdot 10^{10}$ (1) $5,42 \cdot 10^8$	$1,29 \cdot 10^{10}$ (1) $2,02 \cdot 10^8$	$1,07 \cdot 10^{11}$ (1) $2,54 \cdot 10^9$	$8,51 \cdot 10^{10}$ (1) $5,13 \cdot 10^9$
^{48}V			$1,56 \cdot 10^{11}$ (1) $1,81 \cdot 10^{11}$	$4,64 \cdot 10^{12}$ (5) $9,00 \cdot 10^{12}$
^{52}V	$1,42 \cdot 10^{11}$ (3) $3,57 \cdot 10^{11}$	$5,39 \cdot 10^{10}$ (3) $1,33 \cdot 10^{11}$		
^{53}V		$5,57 \cdot 10^8$ (1) $4,41 \cdot 10^{10}$		
^{49}Cr	$1,63 \cdot 10^{10}$ (3) $2,25 \cdot 10^{10}$	$1,04 \cdot 10^{10}$ (3) $8,39 \cdot 10^9$	$9,50 \cdot 10^{10}$ (3) $1,22 \cdot 10^{11}$	$1,85 \cdot 10^{11}$ (2) $2,71 \cdot 10^{11}$
^{51}Cr	$2,42 \cdot 10^{12}$ (1) $3,20 \cdot 10^{12}$	$1,26 \cdot 10^{12}$ (1) $1,19 \cdot 10^{12}$	$1,92 \cdot 10^{13}$ (1) $3,20 \cdot 10^{13}$	$8,66 \cdot 10^{14}$ (1) $1,16 \cdot 10^{15}$
^{52g}Mn	$1,63 \cdot 10^9$	$6,09 \cdot 10^8$	$2,66 \cdot 10^{10}$ (6) $1,63 \cdot 10^{10}$	$9,26 \cdot 10^{11}$ (7) $7,53 \cdot 10^{11}$

Isotop	Cr1	Cr2	Cr3	Cr4
^{52m} Mn	7,21 * 10 ⁹ (2)	3,53 * 10 ⁹ (2)	2,45 * 10 ⁹ (2)	
⁵⁴ Mn				2,38 * 10 ¹¹ (1) 3,96 * 10 ¹⁰
⁵⁶ Mn			6,95 * 10 ⁸ (1) < 10	2,93 * 10 ⁹ (1) 62,6

Tabelle 30. Radioaktives Inventar in Chrom: berechnet mit Hilfe der Computerprogramme ALICE, PCROSS und FISPACT für das Ende der Bestrahlung. Der erste Wert ergibt sich als Mittelwert der in Tabelle 26 auf Seite 64 angegebenen Werte. Der zweite Wert ist der errechnete.

Für das Eisen wurden die Ergebnisse in Tabelle 31 einander gegenübergestellt. Von den angegebenen Nukliden enthält die EAF-Bibliothek für die folgenden Nuklide Produktionswirkungsquerschnitte: ⁵¹Cr, ⁵²Mn, ⁵⁴Mn, ⁵⁶Mn und ⁵³Fe. Die Tabelle zeigt gute Übereinstimmung für das Nuklid ⁵¹Cr. Die wichtigsten Wirkungsquerschnitte sind ⁵⁴Fe(n,α) und ⁵⁶Fe(n,2n), wobei letzterer nicht in der EAF-Bibliothek enthalten ist, weil er eine Schwelle über 20 MeV hat.

Für den Grundzustand des Nuklids ⁵²Mn sind die Wirkungsquerschnitte der Reaktionen ⁵⁴Fe(n,n'd) und ⁵⁴Fe(n,t) etwas zu hoch.

Gute Übereinstimmung findet sich wieder bei den Nukliden ⁵⁴Mn und ⁵⁶Mn. Die wichtigsten Wirkungsquerschnitte sind ⁵⁴Fe(n,p) und ⁵⁶Fe(n,t) für das ⁵⁴Mn und ⁵⁶Fe(n,p) für das ⁵⁶Mn. Die Wirkungsquerschnitte für diese Reaktionen aus der EAF-Bibliothek stimmen mit experimentell ermittelten Werten überein.

Das Nuklid ⁵³Fe ist wieder ein kurzlebige Isotop. Die Korrekturfaktoren betragen 1,5, 1,3 und 1,1 für die Ergebnisse der Proben Fe2, Fe3 und Fe6, was als Erklärung für die Diskrepanz zwischen gemessenem und errechnetem Wert nicht ausreicht. Für die Produktion von ⁵³Fe sind die beiden Reaktionen ⁵⁴Fe(n,2n) und ⁵⁶Fe(n,4n) verantwortlich. Da letztere aber eine Schwelle oberhalb 20 MeV hat, sind dafür keine Wirkungsquerschnitte in der EAF-Bibliothek enthalten.

Die zu niedrig berechneten Inventare für die fünf Kobaltisotope ⁵⁵Co, ⁵⁶Co, ⁵⁷Co, ⁵⁸Co und ⁶⁰Co weisen darauf hin, daß bei der Rechnung die sequentiellen Reaktionen der Tritonen nicht berücksichtigt werden konnten, weil das Programm ALICE keine Produktionswirkungsquerschnitte und Spektren für Tritonen liefert. Am größten ist die Abweichung für ⁶⁰Co, weil die Konkurrenzreaktionen zu ⁵⁶Fe(t,n) alle mindestens eine Reaktionsstufe mehr haben.

Am Beispiel des Eisens mit dem hohen Kobaltinventar zeigt sich, daß die Bedeutung der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen mit höherer Neutronenenergie zunimmt. Bei den Aktivierungsrechnungen in Kapitel 4 war für Eisen kein Effekt durch sequentielle Reaktionen geladener Teilchen zu verzeichnen. Die häufig gute Übereinstimmung zwischen experimentell und rechnerisch bestimmtem Inventar für Eisen, dessen Bestrahlung als Kontrolle diente, läßt auch die Ergebnisse für Chrom und Vanadin entsprechend glaubwürdig erscheinen.

Isotop	Fe2	Fe3	Fe4	Fe5	Fe6
⁴⁸ Sc			1,91 * 10 ⁹ (1) 4,73 * 10 ⁷	1,00 * 10 ¹⁰ (2) 9,12 * 10 ⁸	

Iso- top	Fe2	Fe3	Fe4	Fe5	Fe6
⁴⁸ V				5,78 * 10 ¹⁰ (2) 2,95 * 10 ¹⁰	
⁵² V					7,37 * 10 ⁸ (1) 1,01 * 10 ⁹
⁴⁹ Cr	5,33 * 10 ⁸ (1) 1,07 * 10 ⁹	1,24 * 10 ⁹ (1) 1,01 * 10 ⁹			
⁵¹ Cr				2,87 * 10 ¹³ (1) 2,98 * 10 ¹³	
^{52g} Mn	3,59 * 10 ¹⁰	3,37 * 10 ¹⁰	1,85 * 10 ¹¹ (4) 6,10 * 10 ¹¹	4,81 * 10 ¹² (9) 1,49 * 10 ¹³	8,73 * 10 ⁹
^{52m} Mn	8,12 * 10 ⁹ (1)	5,46 * 10 ⁹ (1)	2,10 * 10 ¹⁰ (1)		2,18 * 10 ⁹ (1)
⁵⁴ Mn			7,73 * 10 ¹² (1) 8,85 * 10 ¹²	2,21 * 10 ¹⁴ (1) 2,23 * 10 ¹⁴	
⁵⁶ Mn	4,26 * 10 ¹¹ (2) 4,80 * 10 ¹¹	3,91 * 10 ¹¹ (2) 4,51 * 10 ¹¹	6,19 * 10 ¹² (3) 6,81 * 10 ¹²		1,07 * 10 ¹¹ (3) 1,17 * 10 ¹¹
^{52g} Fe			5,15 * 10 ⁹ (1) 3,73 * 10 ¹⁰	3,25 * 10 ¹⁰ (1) 2,89 * 10 ¹¹	
^{53g} Fe	1,17 * 10 ¹⁰ (1) 2,87 * 10 ¹⁰	9,37 * 10 ⁹ (1) 2,75 * 10 ¹⁰			3,67 * 10 ⁹ (1) 7,11 * 10 ⁹
^{53m} Fe					7,21 * 10 ⁷ (2)
⁵⁵ Co			2,15 * 10 ¹⁰ (5) 2,70 * 10 ⁹	4,40 * 10 ¹¹ (6) 3,56 * 10 ¹⁰	
⁵⁶ Co			3,48 * 10 ¹¹ (1) 4,24 * 10 ¹⁰	1,15 * 10 ¹³ (12) 1,09 * 10 ¹²	
⁵⁷ Co				3,25 * 10 ¹² (2) 6,25 * 10 ¹⁰	
^{58g} Co				1,57 * 10 ¹¹ (1) 4,99 * 10 ⁹	
⁶⁰ Co				4,05 * 10 ⁹ (2) 10,4	

Tabelle 31. Radioaktives Inventar in Eisen: berechnet mit Hilfe der Computerprogramme ALICE, PCROSS und FISPACT für das Ende der Bestrahlung. Der erste Wert ergibt sich als Mittelwert der in Tabelle 28 auf Seite 67 angegebenen Werte. Der zweite Wert ist der errechnete.

5.4.3 Datenunsicherheit am Beispiel Teflon

Wie schon zu Beginn des Abschnitts 5.3 erwähnt, hat die Vorhersage unbekannter Wirkungsquerschnitte einige Unsicherheiten zur Folge. Dies soll am Beispiel der ²²Na-Produktion in Teflon nochmals erläutert werden. Die wichtigsten Reaktionen für die

^{22}Na -Produktion sind die Produktion der α -Teilchen durch folgende neutroneninduzierte Reaktionen:

- $^{12}\text{C} (n, \alpha)$
- $^{12}\text{C} (n, n' 3\alpha)$
- $^{13}\text{C} (n, \alpha)$
- $^{13}\text{C} (n, n' \alpha)$
- $^{19}\text{F} (n, \alpha)$
- $^{19}\text{F} (n, n' \alpha)$

sowie die Reaktion der α -Teilchen an ^{19}F :

- $^{19}\text{F} (\alpha, n) ^{22}\text{Na}$

Von diesen sieben Wirkungsquerschnitten können lediglich die ersten beiden als gut bekannt gelten, alle anderen sind nur unzureichend oder gar nicht gemessen. Außerdem reichen die Daten der EAF-Bibliothek nur bis 20 MeV. Deshalb wurden alle Wirkungsquerschnitte sowie die Energiespektren der erzeugten α -Teilchen mit dem Programm ALICE gerechnet und die Wirkungsquerschnitte der neutroneninduzierten Reaktionen bei 14,5 MeV mit Hilfe der Daten der EAF-Bibliothek renormiert. Die Spektren wurden auf 1 normiert, um dann während der Rechnung mit den Wirkungsquerschnitten multipliziert zu werden. Ein erstes Maß für die Unsicherheiten und die Güte des Programmes ALICE können die Renormierungsfaktoren für die Produktion der α -Teilchen geben. Sie sind:

für ^{12}C 1,16,
für ^{13}C 2,64 und
für ^{19}F 0,099.

Die benutzten Daten stammen aus der Bibliothek EAF Version 2. Benutzt man die Daten der jüngst erschienenen Version 4.0, so ergeben sich folgende Renormierungsfaktoren:

für ^{12}C 1,16,
für ^{13}C 1558 und
für ^{19}F 0,60.

Rechnet man mit den zuletzt genannten Werten, erhält man ein Anfangsinventar von $9,50 \cdot 10^{10}$ Atomen, also das fünffache des Wertes, den man mit den EAF-2-Daten erhält ($1,85 \cdot 10^{10}$ Atomen). Alle anderen Eingabedaten waren bei den beiden Rechnungen gleich. Ursache für diese Diskrepanz sind vor allem die unbekannteren Wirkungsquerschnitte an ^{13}C . Welcher der beiden Datensätze der bessere ist läßt sich allerdings so ohne weiteres nicht sagen, da ja auch der (α, n) -Wirkungsquerschnitt nur mit ALICE gerechnet wurde.

Bei den Messungen an Teflon ergab sich ein weiteres Beispiel. Ausgehend vom Kohlenstoff wurde durch die hochenergetischen Neutronen ^7Be erzeugt. Die Auswertung der Messungen ergab ein Anfangsinventar von $8,67 \cdot 10^{10}$ Atomen. Die Rechnung mit dem von ALICE errechneten, in der EAF-Bibliothek nicht enthaltenen Wirkungsquerschnitt für die Reaktion $^{12}\text{C} (n, 2n\alpha) ^7\text{Be}$ ergab $5,77 \cdot 10^{10}$ Atome. Das bedeutet einen Fehler von rund 35 %, was schon in der Größenordnung des experimentellen Fehlers liegt.

6. Zusammenfassung und Ausblick

Ziele der Arbeit waren die systematische Untersuchung aller stabilen Elemente auf die Auswirkungen der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen sowie eine Beurteilung einiger wichtiger Werkstoffe unter kernphysikalischen Gesichtspunkten mit Hilfe von Aktivierungsrechnungen. Durch integrale Aktivierungsexperimente sollten darüberhinaus

die rechnerischen Ergebnisse untermauert werden. Zur Durchführung der Aktivierungsrechnungen wurde das europäische Aktivierungssystem EASY benutzt, das für die sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen durch das Programm PCROSS und die Datenbibliotheken KFKSPEC, KFKXN und KFKSTOPP ergänzt wurde. Bei 31 von 81 untersuchten Elementen zeigten sich Zuwächse von mindestens 10 % in der Aktivierbarkeit durch die Hinzunahme der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen. Am größten war der Effekt bei den Elementen Fluor, Natrium, Vanadin und Gold.

Bei der Beurteilung von Werkstoffen wurden vier Werkstoffklassen angesprochen: Titanlegierungen, Vanadinlegierungen, Stähle und Keramiken. Das Hauptinteresse lag dabei auf den Vanadinlegierungen und den ferritisch-martensitischen Stählen. Die Vorteile von Vanadin liegen bei der sehr niedrigen Langzeitaktivität, die aber nur bei einer entsprechenden Wahl der Legierungselemente und sehr niedrigen Konzentrationen für Verunreinigungen in den Legierungen erhalten bleibt. Schwierigkeiten bereiten die Wasserstoff und Heliumproduktion durch neutroneninduzierte Kernreaktionen. Der Vorteil der ferritisch-martensitischen Stähle liegt darin, daß sie praktisch alle Kriterien ohne größere Schwachpunkte gut erfüllen.

Ein wichtiges Ergebnis für alle Werkstoffklassen ist die Erkenntnis, daß für die Aktivierbarkeit von Werkstoffen nicht nur deren primäre Zusammensetzung, sondern auch deren Gehalt an Verunreinigungen bedeutsam ist. Dies wurde vor allem am Beispiel der Vanadinlegierungen gezeigt, bei denen die Vorteile der Legierungselemente durch die technisch derzeit nicht weiter reduzierbaren Verunreinigungen zu einem großen Teil wieder aufgehoben werden. Darüberhinaus wurden die besonders kritischen Verunreinigungselemente identifiziert.

Um die Aussagekraft der Aktivierungsrechnungen zu erhöhen, müssen die Programme und Datenbanken ständig überarbeitet und erweitert werden. Dieser fortlaufende Prozeß führte zu der jüngst erschienenen Version 4 des Programms FISPACT [67], das jetzt das Programm PCROSS enthält, und der EAF-Bibliothek mit einer Vielzahl von überarbeiteten Wirkungsquerschnitten. Diese Arbeit wird im Rahmen des europäischen Fusionsprojektes fortgeführt.

Die integralen Aktivierungsexperimente haben gezeigt, daß die Bestrahlungseinrichtung am Karlsruher Isochron-Zyklotron für die Überprüfung von Wirkungsquerschnitten geeignet ist. Der Effekt der sequentiellen Reaktionen geladener Teilchen konnte am Beispiel des Fluors bestätigt werden, und die Bestrahlung von Eisen hat gezeigt, daß die Messungen brauchbare Ergebnisse liefern, wodurch die Resultate für Vanadin und Chrom bekräftigt wurden. Außerdem sollte die Bestrahlungseinrichtung auf Grund des ähnlichen Neutronenspektrums für Voruntersuchungen zur intensiven Neutronenquelle IFMIF geeignet sein, um die Auswertung der dort zu erwartenden Ergebnisse vorzubereiten und zu erleichtern.

Anhang A. Die Datenstrukturen GAM-II und VITAMIN-J

Um Daten mit Hilfe eines Computers zu verarbeiten, müssen sie zunächst in eine Form gebracht werden, daß der Computer sie auch lesen kann, d.h. sie müssen in diskrete Werte umgewandelt werden. Dazu wurden, um den Austausch von Daten zu erleichtern, verschiedene Datenstrukturen definiert. Zwei davon sind die hier genannten GAM-II und VITAMIN-J. Sie finden vor allem im Zusammenhang mit Neutronenrechnungen Verwendung. Neutronenwirkungsquerschnitte beginnen häufig bei sehr niedrigen Energien vor allem (n, γ)-Wirkungsquerschnitte. Sie haben ihr Maximum meist unterhalb 1 MeV. Andere Reaktionen haben dagegen Schwellen von mehreren MeV. Um beides gleichzeitig adäquat beschreiben zu können, benutzen GAM-II und VITAMIN-J eine logarithmische Energieskala. Sie unterscheiden sich in der maximalen Energie und in der Feinheit der Struktur. Die folgenden beiden Tabellen enthalten jeweils die obere Energiegrenze für die Intervalle sowie das Neutronenspektrum der ersten Wand des EEF-Reaktors.

Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]	Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]
1	1,4918 * 10 ⁷	2,9372 * 10 ¹⁴	51	8,6517 * 10 ⁴	2,9586 * 10 ¹³
2	1,3499 * 10 ⁷	1,6365 * 10 ¹³	52	6,7379 * 10 ⁴	2,1901 * 10 ¹³
3	1,2214 * 10 ⁷	4,9096 * 10 ¹²	53	5,2475 * 10 ⁴	2,2710 * 10 ¹³
4	1,1052 * 10 ⁷	5,3501 * 10 ¹²	54	4,0868 * 10 ⁴	1,7959 * 10 ¹³
5	1,0000 * 10 ⁷	6,3564 * 10 ¹²	55	3,1828 * 10 ⁴	2,5671 * 10 ¹³
6	9,0484 * 10 ⁶	6,2451 * 10 ¹²	56	2,4788 * 10 ⁴	2,0203 * 10 ¹³
7	8,1873 * 10 ⁶	5,5718 * 10 ¹²	57	1,9305 * 10 ⁴	1,8039 * 10 ¹³
8	7,4082 * 10 ⁶	5,9980 * 10 ¹²	58	1,5034 * 10 ⁴	1,7710 * 10 ¹³
9	6,7032 * 10 ⁶	5,9154 * 10 ¹²	59	1,1709 * 10 ⁴	1,6157 * 10 ¹³
10	6,0653 * 10 ⁶	5,6159 * 10 ¹²	60	9,1188 * 10 ³	1,4047 * 10 ¹³
11	5,4881 * 10 ⁶	5,8312 * 10 ¹²	61	7,1017 * 10 ³	1,6785 * 10 ¹³
12	4,9659 * 10 ⁶	6,4136 * 10 ¹²	62	5,5308 * 10 ³	1,6605 * 10 ¹³
13	4,4933 * 10 ⁶	7,3030 * 10 ¹²	63	4,3074 * 10 ³	1,6687 * 10 ¹³
14	4,0657 * 10 ⁶	8,4133 * 10 ¹²	64	3,3546 * 10 ³	1,6087 * 10 ¹³
15	3,6788 * 10 ⁶	9,5619 * 10 ¹²	65	2,6126 * 10 ³	1,5467 * 10 ¹³
16	3,3287 * 10 ⁶	1,1393 * 10 ¹³	66	2,0374 * 10 ³	1,4917 * 10 ¹³
17	3,0119 * 10 ⁶	1,3226 * 10 ¹³	67	1,5846 * 10 ³	1,4700 * 10 ¹³
18	2,7253 * 10 ⁶	1,5411 * 10 ¹³	68	1,2341 * 10 ³	1,2856 * 10 ¹³
19	2,4660 * 10 ⁶	1,8776 * 10 ¹³	69	9,6112 * 10 ²	1,3487 * 10 ¹³
20	2,2313 * 10 ⁶	1,9089 * 10 ¹³	70	7,4852 * 10 ²	1,3466 * 10 ¹³
21	2,0190 * 10 ⁶	2,1192 * 10 ¹³	71	5,8295 * 10 ²	1,3236 * 10 ¹³
22	1,8268 * 10 ⁶	2,3978 * 10 ¹³	72	4,5400 * 10 ²	1,2981 * 10 ¹³
23	1,6530 * 10 ⁶	2,4265 * 10 ¹³	73	3,5357 * 10 ²	1,2811 * 10 ¹³
24	1,4957 * 10 ⁶	2,7697 * 10 ¹³	74	2,7536 * 10 ²	1,2547 * 10 ¹³

Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]	Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]
25	1,3534 * 10 ⁶	2,6805 * 10 ¹³	75	2,1445 * 10 ²	1,2258 * 10 ¹³
26	1,2246 * 10 ⁶	3,2577 * 10 ¹³	76	1,6702 * 10 ²	1,1694 * 10 ¹³
27	1,1080 * 10 ⁶	2,6952 * 10 ¹³	77	1,3007 * 10 ²	1,1671 * 10 ¹³
28	1,0026 * 10 ⁶	3,0163 * 10 ¹³	78	1,0130 * 10 ²	1,1321 * 10 ¹³
29	9,0718 * 10 ⁵	3,0678 * 10 ¹³	79	7,8893 * 10 ¹	1,0960 * 10 ¹³
30	8,2085 * 10 ⁵	3,0013 * 10 ¹³	80	6,1442 * 10 ¹	1,0610 * 10 ¹³
31	7,4274 * 10 ⁵	3,5726 * 10 ¹³	81	4,7851 * 10 ¹	9,7820 * 10 ¹²
32	6,7206 * 10 ⁵	3,6478 * 10 ¹³	82	3,7267 * 10 ¹	9,6816 * 10 ¹²
33	6,0810 * 10 ⁵	3,1176 * 10 ¹³	83	2,9023 * 10 ¹	9,3686 * 10 ¹²
34	5,5023 * 10 ⁵	2,7125 * 10 ¹³	84	2,2603 * 10 ¹	8,9993 * 10 ¹²
35	4,9787 * 10 ⁵	2,4379 * 10 ¹³	85	1,7603 * 10 ¹	8,6116 * 10 ¹²
36	4,5049 * 10 ⁵	1,8406 * 10 ¹³	86	1,3710 * 10 ¹	8,1985 * 10 ¹²
37	4,0762 * 10 ⁵	2,3685 * 10 ¹³	87	1,0677 * 10 ¹	7,8128 * 10 ¹²
38	3,6883 * 10 ⁵	2,4369 * 10 ¹³	88	8,3153 * 10 ⁰	7,4203 * 10 ¹²
39	3,3373 * 10 ⁵	2,3919 * 10 ¹³	89	6,4760 * 10 ⁰	7,0275 * 10 ¹²
40	3,0197 * 10 ⁵	1,6648 * 10 ¹³	90	5,0435 * 10 ⁰	6,6380 * 10 ¹²
41	2,7324 * 10 ⁵	1,8930 * 10 ¹³	91	3,9279 * 10 ⁰	6,2537 * 10 ¹²
42	2,4724 * 10 ⁵	1,6668 * 10 ¹³	92	3,0590 * 10 ⁰	5,8763 * 10 ¹²
43	2,2371 * 10 ⁵	1,5909 * 10 ¹³	93	2,3824 * 10 ⁰	5,5067 * 10 ¹²
44	2,0242 * 10 ⁵	1,3270 * 10 ¹³	94	1,8554 * 10 ⁰	5,1458 * 10 ¹²
45	1,8316 * 10 ⁵	1,5579 * 10 ¹³	95	1,4450 * 10 ⁰	4,7890 * 10 ¹²
46	1,6573 * 10 ⁵	1,4034 * 10 ¹³	96	1,1254 * 10 ⁰	4,4448 * 10 ¹²
47	1,4996 * 10 ⁵	1,2696 * 10 ¹³	97	8,7642 * 10 ⁻¹	4,1129 * 10 ¹²
48	1,3569 * 10 ⁵	1,5462 * 10 ¹³	98	6,8256 * 10 ⁻¹	3,7914 * 10 ¹²
49	1,2277 * 10 ⁵	1,2911 * 10 ¹³	99	5,3158 * 10 ⁻¹	3,4763 * 10 ¹²
50	1,1109 * 10 ⁵	2,6147 * 10 ¹³	100	4,1399 * 10 ⁻¹	2,9894 * 10 ¹³

Tabelle 32. Die Datenstruktur GAM-II: Nach der Gruppennummer und der oberen Energieintervallgrenze ist das Neutronenspektrum der ersten Wand des EEF-Reaktors für eine Bestrahlungsbelastung von 4,15 MW/m² angegeben. Die untere Intervallgrenze für das letzte Intervall ist 10⁻⁵ eV.

Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]	Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]
1	1,96403 * 10 ⁷	0,0	89	2,47235 * 10 ⁵	8,56156 * 10 ¹²
2	1,73325 * 10 ⁷	0,0	90	2,35177 * 10 ⁵	8,21152 * 10 ¹²

Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]	Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]
3	1,69046 * 10 ⁷	0,0	91	2,23708 * 10 ⁵	8,02187 * 10 ¹²
4	1,64872 * 10 ⁷	0,0	92	2,12797 * 10 ⁵	7,56139 * 10 ¹²
5	1,56831 * 10 ⁷	0,0	93	2,02419 * 10 ⁵	6,88709 * 10 ¹²
6	1,49182 * 10 ⁷	9,53405 * 10 ¹³	94	1,92547 * 10 ⁵	6,93887 * 10 ¹²
7	1,45499 * 10 ⁷	7,57866 * 10 ¹³	95	1,83156 * 10 ⁵	7,50836 * 10 ¹²
8	1,41907 * 10 ⁷	5,75544 * 10 ¹³	96	1,74224 * 10 ⁵	7,53394 * 10 ¹²
9	1,38403 * 10 ⁷	4,05702 * 10 ¹³	97	1,65727 * 10 ⁵	7,15063 * 10 ¹²
10	1,34986 * 10 ⁷	3,48353 * 10 ¹³	98	1,57644 * 10 ⁵	6,79452 * 10 ¹²
11	1,28403 * 10 ⁷	3,34915 * 10 ¹²	99	1,49956 * 10 ⁵	6,46252 * 10 ¹²
12	1,25232 * 10 ⁷	2,64881 * 10 ¹²	100	1,42642 * 10 ⁵	6,71885 * 10 ¹²
13	1,22140 * 10 ⁷	3,24320 * 10 ¹²	101	1,35686 * 10 ⁵	7,40134 * 10 ¹²
14	1,16183 * 10 ⁷	2,21820 * 10 ¹²	102	1,29068 * 10 ⁵	7,33095 * 10 ¹²
15	1,10517 * 10 ⁷	2,31410 * 10 ¹²	103	1,22773 * 10 ⁵	6,69900 * 10 ¹²
16	1,05127 * 10 ⁷	2,48420 * 10 ¹²	104	1,16786 * 10 ⁵	6,21286 * 10 ¹²
17	1,00000 * 10 ⁷	3,12189 * 10 ¹²	105	1,11090 * 10 ⁵	1,39637 * 10 ¹³
18	9,51229 * 10 ⁶	3,21583 * 10 ¹²	106	9,80366 * 10 ⁴	1,38199 * 10 ¹³
19	9,04837 * 10 ⁶	3,18713 * 10 ¹²	107	8,65170 * 10 ⁴	5,49766 * 10 ¹²
20	8,60708 * 10 ⁶	3,07665 * 10 ¹²	108	8,25000 * 10 ⁴	4,34668 * 10 ¹²
21	8,18731 * 10 ⁶	2,83913 * 10 ¹²	109	7,95000 * 10 ⁴	1,14363 * 10 ¹³
22	7,78801 * 10 ⁶	2,82913 * 10 ¹²	110	7,20000 * 10 ⁴	6,98183 * 10 ¹²
23	7,40818 * 10 ⁶	2,93373 * 10 ¹²	111	6,73795 * 10 ⁴	1,58803 * 10 ¹³
24	7,04688 * 10 ⁶	2,96781 * 10 ¹²	112	5,65622 * 10 ⁴	6,76882 * 10 ¹²
25	6,70320 * 10 ⁶	9,89202 * 10 ¹¹	113	5,24752 * 10 ⁴	1,13652 * 10 ¹³
26	6,59241 * 10 ⁶	1,96969 * 10 ¹²	114	4,63092 * 10 ⁴	1,06186 * 10 ¹³
27	6,37628 * 10 ⁶	2,90743 * 10 ¹²	115	4,08677 * 10 ⁴	1,29174 * 10 ¹³
28	6,06531 * 10 ⁶	2,83272 * 10 ¹²	116	3,43067 * 10 ⁴	6,55569 * 10 ¹²
29	5,76950 * 10 ⁶	2,83225 * 10 ¹²	117	3,18278 * 10 ⁴	1,07770 * 10 ¹³
30	5,48812 * 10 ⁶	2,86252 * 10 ¹²	118	2,85000 * 10 ⁴	5,43897 * 10 ¹²
31	5,48812 * 10 ⁶	2,96919 * 10 ¹²	119	2,70007 * 10 ⁴	3,41929 * 10 ¹²
32	4,96585 * 10 ⁶	3,11175 * 10 ¹²	120	2,60584 * 10 ⁴	4,62313 * 10 ¹²
33	4,72367 * 10 ⁶	3,30133 * 10 ¹²	121	2,47875 * 10 ⁴	2,22982 * 10 ¹²
34	4,49329 * 10 ⁶	7,24292 * 10 ¹²	122	2,41755 * 10 ⁴	2,17696 * 10 ¹²
35	4,06570 * 10 ⁶	8,34407 * 10 ¹²	123	2,35786 * 10 ⁴	6,22558 * 10 ¹²
36	3,67879 * 10 ⁶	9,48324 * 10 ¹²	124	2,18749 * 10 ⁴	9,81439 * 10 ¹²

Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]	Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]
37	3,32871 * 10 ⁶	5,46817 * 10 ¹²	125	1,93045 * 10 ⁴	1,79096 * 10 ¹³
38	3,16637 * 10 ⁶	5,92774 * 10 ¹²	126	1,50344 * 10 ⁴	1,75829 * 10 ¹³
39	3,01194 * 10 ⁶	6,37913 * 10 ¹²	127	1,17088 * 10 ⁴	6,64914 * 10 ¹²
40	2,86505 * 10 ⁶	6,88965 * 10 ¹²	128	1,05946 * 10 ⁴	9,39722 * 10 ¹²
41	2,72532 * 10 ⁶	7,42775 * 10 ¹²	129	9,11882 * 10 ³	1,39956 * 10 ¹³
42	2,59240 * 10 ⁶	8,14553 * 10 ¹²	130	7,10174 * 10 ³	1,67233 * 10 ¹³
43	2,46597 * 10 ⁶	5,95530 * 10 ¹²	131	5,53084 * 10 ³	1,65441 * 10 ¹³
44	2,38513 * 10 ⁶	1,54116 * 10 ¹²	132	4,30743 * 10 ³	1,00875 * 10 ¹³
45	2,36533 * 10 ⁶	1,56065 * 10 ¹²	133	3,70744 * 10 ³	6,67469 * 10 ¹²
46	2,34570 * 10 ⁶	3,14320 * 10 ¹²	134	3,35463 * 10 ³	6,56491 * 10 ¹²
47	2,30693 * 10 ⁶	6,32298 * 10 ¹²	135	3,03539 * 10 ³	6,44465 * 10 ¹²
48	2,23130 * 10 ⁶	9,54240 * 10 ¹²	136	2,74654 * 10 ³	3,20593 * 10 ¹²
49	2,12248 * 10 ⁶	9,88277 * 10 ¹²	137	2,61259 * 10 ³	3,17740 * 10 ¹²
50	2,01897 * 10 ⁶	1,04048 * 10 ¹³	138	2,48517 * 10 ³	6,22778 * 10 ¹²
51	1,92050 * 10 ⁶	1,10370 * 10 ¹³	139	2,24867 * 10 ³	6,18773 * 10 ¹²
52	1,82684 * 10 ⁶	1,17290 * 10 ¹³	140	2,03468 * 10 ³	1,48623 * 10 ¹³
53	1,73774 * 10 ⁶	1,20725 * 10 ¹³	141	1,58461 * 10 ³	1,46461 * 10 ¹³
54	1,65299 * 10 ⁶	1,21418 * 10 ¹³	142	1,23410 * 10 ³	1,28089 * 10 ¹³
55	1,57237 * 10 ⁶	1,26725 * 10 ¹³	143	9,61117 * 10 ²	1,34870 * 10 ¹³
56	1,49569 * 10 ⁶	1,35252 * 10 ¹³	144	7,48518 * 10 ²	1,34660 * 10 ¹³
57	1,42274 * 10 ⁶	1,37675 * 10 ¹³	145	5,82947 * 10 ²	1,32360 * 10 ¹³
58	1,35335 * 10 ⁶	1,35428 * 10 ¹³	146	4,53999 * 10 ²	1,29810 * 10 ¹³
59	1,28735 * 10 ⁶	1,42862 * 10 ¹³	147	3,53575 * 10 ²	1,28110 * 10 ¹³
60	1,22456 * 10 ⁶	1,57215 * 10 ¹³	148	2,75364 * 10 ²	1,25470 * 10 ¹³
61	1,16484 * 10 ⁶	1,55298 * 10 ¹³	149	2,14454 * 10 ²	1,22580 * 10 ¹³
62	1,10803 * 10 ⁶	2,69823 * 10 ¹³	150	1,67017 * 10 ²	1,16940 * 10 ¹³
63	1,00259 * 10 ⁶	1,22766 * 10 ¹³	151	1,30073 * 10 ²	1,16710 * 10 ¹³
64	9,61672 * 10 ⁵	1,77280 * 10 ¹³	152	1,01301 * 10 ²	1,13210 * 10 ¹³
65	9,07180 * 10 ⁵	1,53373 * 10 ¹³	153	7,88932 * 10 ¹	1,09600 * 10 ¹³
66	8,62936 * 10 ⁵	1,52992 * 10 ¹³	154	6,14421 * 10 ¹	1,06100 * 10 ¹³
67	8,20850 * 10 ⁵	1,51306 * 10 ¹³	155	4,78512 * 10 ¹	9,78202 * 10 ¹²
68	7,80817 * 10 ⁵	1,58904 * 10 ¹³	156	3,72665 * 10 ¹	9,68159 * 10 ¹²
69	7,42736 * 10 ⁵	1,73110 * 10 ¹³	157	2,90232 * 10 ¹	9,36860 * 10 ¹²
70	7,06512 * 10 ⁵	1,80380 * 10 ¹³	158	2,26033 * 10 ¹	8,99930 * 10 ¹²

Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]	Gruppe	Obere Intervallgrenze [eV]	Neutronen [n/cm ² /s]
71	6,72055 * 10 ⁵	1,82220 * 10 ¹³	159	1,76035 * 10 ¹	8,61160 * 10 ¹²
72	6,39279 * 10 ⁵	1,75374 * 10 ¹³	160	1,37096 * 10 ¹	8,19850 * 10 ¹²
73	6,08101 * 10 ⁵	1,62130 * 10 ¹³	161	1,06770 * 10 ¹	7,81280 * 10 ¹²
74	5,78443 * 10 ⁵	1,50580 * 10 ¹³	162	8,31529 * 10 ⁰	7,42030 * 10 ¹²
75	5,50232 * 10 ⁵	1,40458 * 10 ¹³	163	6,47595 * 10 ⁰	7,02750 * 10 ¹²
76	5,23397 * 10 ⁵	1,32143 * 10 ¹³	164	5,04348 * 10 ⁰	6,63800 * 10 ¹²
77	4,97871 * 10 ⁵	2,44061 * 10 ¹³	165	3,92786 * 10 ⁰	6,25370 * 10 ¹²
78	4,50492 * 10 ⁵	1,83307 * 10 ¹³	166	3,05902 * 10 ⁰	5,87630 * 10 ¹²
79	4,07622 * 10 ⁵	1,12569 * 10 ¹³	167	2,38237 * 10 ⁰	5,50670 * 10 ¹²
80	3,87742 * 10 ⁵	1,19227 * 10 ¹³	168	1,85539 * 10 ⁰	5,14580 * 10 ¹²
81	3,68832 * 10 ⁵	2,42681 * 10 ¹³	169	1,44498 * 10 ⁰	4,78900 * 10 ¹²
82	3,33733 * 10 ⁵	2,38201 * 10 ¹³	170	1,12535 * 10 ⁰	4,44480 * 10 ¹²
83	3,01974 * 10 ⁵	2,26116 * 10 ¹²	171	8,76425 * 10 ⁻¹	4,11289 * 10 ¹²
84	2,98500 * 10 ⁵	8,13569 * 10 ¹¹	172	6,82560 * 10 ⁻¹	3,79140 * 10 ¹²
85	2,97200 * 10 ⁵	1,68101 * 10 ¹²	173	5,31579 * 10 ⁻¹	3,47630 * 10 ¹²
86	2,94518 * 10 ⁵	4,33189 * 10 ¹²	174	4,13994 * 10 ⁻¹	2,01547 * 10 ¹³
87	2,87546 * 10 ⁵	8,64026 * 10 ¹²	175	1,00000 * 10 ⁻¹	9,73933 * 10 ¹²
88	2,73237 * 10 ⁵	1,88513 * 10 ¹³			

Tabelle 33. Die Datenstruktur VITAMIN-J: Nach der Gruppennummer und der oberen Energieintervallgrenze ist das Neutronenspektrum der ersten Wand des EEF-Reaktors für eine Bestrahlungsbelastung von 4,15 MW/m² angegeben. Die untere Intervallgrenze für das letzte Intervall ist 10⁻⁵ eV.

Anhang B. Liste der verwendeten Abkürzungen

AEA	Atomic Energy Authority of the United Kingdom (auch UKAEA)
ALICE	Computerprogramm zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten
EAF	European Activation File
EASY	Europäisches AktivierungsSystem
ECN	Energieforschungszentrum der Niederlande Petten (Energieonderzoek Centrum Nederland)
EEF	Economic potential and Environmental impact of Fusion
FISPIN	FISsion Product INventory code
FISPACT	FISP von FISPIN und ACT für Activation
IFMIF	International Fusion Material Irradiation Facility
ITER	International Themonuclear Experimental Reactor
KFKSPEC	Datenbibliothek mit Spektren geladener Teilchen aus (n,x) Reaktionen (x = p, d, t, ³ He, α)
KFKXN	Datenbibliothek mit (x,n) Wirkungsquerschnitten (x = p, d, t, ³ He, α)
KFKSTOPP	Datenbibliothek mit differentiellen Reichweiten geladener Teilchen in Materie
KIZ	Karlsruher Isochron Zyklotron
NET	Next European Torus
PCROSS	Programm zur Berechnung von Pseudowirkungsquerschnitten (Pseudo CROSS section)
PRAL	Projected Range Algorithm, Programm zur Berechnung von Eindringtiefen von Ionen in Materie

Literaturverzeichnis

- [1] S. Cierjacks and Y. Hino, The Role of Sequential (x,n) Reactions on Element Activation of Fusion Reactor Materials and Related Nuclear Data Needs, Proc. Specialist's Meeting on Neutron Cross Sections for Fusion and Fusion Energy Applications, Argonne, Illinois, USA, Sept. 13 - 15, 1989, NEANDC-256, S. 19, M. Wagner and H. Vonach (HRGB), OECD (1989).
- [2] S. Cierjacks and Y. Hino, The Importance of Sequential (x,n) Reactions on Element Activation of Fusion Reactor Materials, J. Nucl. Mat. 170, S. 134 (1990).
- [3] S. Cierjacks, Nuclear Data Needs for 'Low-Activation' Fusion Materials Development, Fusion Eng. Des. 13, S. 229 (1990).
- [4] R. A. Forrest and J. Kopecky, The European Activation System (EASY), IAEA Advisory Group Meeting on FENDL-2, Wien (November 1991).
- [5] R. A. Forrest, A. D. J. Endacott, A. Khursheed, FISPACT - Program Manual, Harwell Report, AERE M 3655, (April 1988).
- [6] R. A. Forrest and A. D. J. Endacott, FISPACT - User Manual, Harwell Report, AERE M 3654 (Rev), (July 1990).
- [7] R. F. Burstall, FISPIN A Computer Code for Nuclide Inventory Calculations, Report UKAEA ND-R-328(R), (1979).
- [8] Amjad Khursheed, Neutron-Induced Activation of Materials for the First Wall of Conceptual Fusion Reactors, Dissertation, University of London, London (February 1989).
- [9] J. Sidell, EXTRA - A Digital Computer Program for the Solution of Stiff Sets of Ordinary Initial Value, First Order Differential Equations; Report UKAEA AEEW-R-799, HMSO London (1972).
- [10] O. N. Jarvis, Low-Activity Materials: Reuse and Disposal, Harwell Report, AERE R 10860, (1983).
- [11] L. Giancarli, Impurity, Activation and Surface γ -Dose Levels in First Wall Structural Materials, J. Nucl. Mat. 139, S. 1-10 (1986).
- [12] J. H. Hubble, Photon Mass Attenuation and Energy-absorption Coefficients from 1 keV to 20 MeV, Int. J. Appl. Radiat. Isot. 33, S. 1269-1290 (1982).
- [13] C. B. A. Forty, R. A. Forrest, D. J. Compton and C. Rayner, Handbook of Fusion Activation Data Part1: Elements Hydrogen to Zirconium, Report AEA FUS 180, Culham (May 1992).
- [14] J. Kopecky, H. Gruppelaar, R. A. Forrest, European Activation File for Fusion, International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Jülich, Bundesrepublik Deutschland, 13-17 May 1991, Report ECN-RX-91-050, Petten (1991).
- [15] Recommendations of the IEA Workshop on Low-Activation Materials, Culham, United Kingdom, April 7-12, 1991.
- [16] K. R. Smith, Dosimetric Data for FISPACT, Report CLM-R-299, Culham (1990).
- [17] Regulations for the Safe Transport of Radioactive Material, 1985 Edition, Supplement 1988, Safety Series Nr. 6, IAEA, Wien (1988).

- [18] P. I. H. Cooke, R. Hancox and W. R. Spears, A Reference Tokamak Reactor, Culham Report, CUL-R 298, (1990).
- [19] M. G. Sowerby and R. A. Forrest (HRGB), A Study of the Environmental Impact of Fusion, Harwell Report, AERE R-13708, (1990).
- [20] R. A. Forrest, Reference Neutron Spectra for Inventory Calculations, Harwell Laboratory, (1991).
- [21] S. Ravndal, P. Obložinský, S. Kelzenberg, S. Cierjacks, User Manual for the KfK Code PCROSS, Report KfK 4873, Karlsruhe (August 1991).
- [22] S. Ravndal, P. Obložinský, S. Kelzenberg, S. Cierjacks, Reference Manual for the KfK Code PCROSS, Report KfK 4956, Karlsruhe (Dezember 1991).
- [23] S. Cierjacks, P. Obložinský, B. Rzehorz, Nuclear Data Libraries for the Treatment of Sequential (x,n) Reactions in Fusion Materials Activation Calculations, Report KfK 4867, Karlsruhe (Juli 1991).
- [24] S. Cierjacks, P. Obložinský, S. Kelzenberg, and B. Rzehorz, Development of a Novel Algorithm and Production of New Nuclear Data Libraries for the Treatment of Sequential (x,n) Reactions in Fusion Material Activation Calculations, Fusion Technology 24, S. 277-287 (November 1993).
- [25] S. M. Grimes, R. C. Haight, and J. D. Anderson, Measurement of Sub-Coulomb-Barrier Charged Particles Emitted from Aluminium and Titanium Bombarded by 15-MeV Neutrons, Nucl. Science and Engineering 62, S. 187-194 (1977).
- S. M. Grimes, R. C. Haight, and J. D. Anderson, Charged-Particle-Producing Reactions of 15-MeV Neutrons on ^{51}V and ^{93}Nb , Phys. Review C, Vol 17, No. 2, S. 508-515 (1978).
- S. M. Grimes and R. C. Haight, K. R. Alvar, H. H. Barschall, and R. R. Borchers, Charged-Particle Emission in Reactions of 15-MeV Neutrons with Isotopes of Chromium, Iron, Nickel, and Copper, Phys. Review C, Vol 19, No. 6, S. 2127-2137 (1979).
- R. C. Haight, S. M. Grimes, and R. G. Johnson, H. H. Barschall, Charged-Particle Emission in Reactions of 15-MeV Neutrons with ^{89}Y , ^{90}Zr , and $^{92,94,95,96}\text{Mo}$, Phys. Review C, Vol 23, No. 2, S. 700-707 (1981).
- S. L. Graham, M. Ahmad, S. M. Grimes, H. Satyanarayana, and S. K. Saraf, Cross Sections and Spectra for (n,xp) and (n,x α) Reactions on ^{58}Ni and ^{60}Ni at Energies of 9.4 and 11 MeV, Nucl. Science and Engineering 95, S. 60-69 (1987).
- M. Ahmad and C. E. Brient, P. M. Egun, S. M. Grimes, S. Saraf, and H. Satyanarayana, Charged-Particle Emission in Reactions of 9 and 11 MeV Neutrons with $^{63,65}\text{Cu}$, Nucl. Science and Engineering 95, S. 296-303 (1987).
- S. K. Saraf, C. E. Brient, P. M. Egun, S. M. Grimes, V. Mishra, and R. S. Pedroni, Cross Sections and Spectra for the ^{54}Fe and ^{56}Fe (n,xp) and (n,x α) Reactions Between 8 and 15 MeV, Nucl. Science and Engineering 107, S. 365-373 (1991).
- [26] O. Schwerer, ECPL-86, The LLNL Evaluated Charged-particle Data Library, Summary of Contents by O. Schwerer, Report IAEA-NDS-56 Rev. 1, IAEA, Vienna (1987).
- [27] R. Feldbacher, The AEP Barnbook DATLIB. Nuclear Reaction Cross Sections and Reactivity Parameter, Library and Files, Report INDC(AUS)-12/G, IAEA, Vienna (1987).

- [28] S. N. Abramovich, B. Ya. Guzhovskij, V. A. Zherebtsov and A. G. Zvenigorodskij, Nuclear Physics Constants for Thermonuclear Fusion, Report INDC(CCCP)-326/L + F, IAEA, Vienna (March 1991).
- [29] P. P. Dmitriev, Radionuclide Yield in Reactions with Protons, Deuterons, Alpha Particles and Helium-3 (Handbook), Report INDC(CCP)-263/G, IAEA, Vienna (1986).
- [30] J. Lange and H. Münzel, Abschätzung unbekannter Anregungsfunktionen für (α, xn) -, (α, pxn) -, (d, xn) - und (p, xn) - Reaktionen, Report KfK-767, Kernforschungszentrum Karlsruhe (1968).
- [31] K. A. Keller, J. Lange and H. Münzel, Q-values and Excitation Functions of Nuclear Reactions. Part c: Estimation of Unknown Excitation Functions and Thick Target Yields from p, d, ^3He and α Reactions, Landolt - Börnstein New Series in Physics 15c, Springer-Verlag, Berlin (1974).
- [32] S. Pearlstein, NNDC Evaluated Charged Particle Reaction Data Library, Report IA-EA-NDS-59 Rev. 1, IAEA, Vienna (1985).
- [33] F. E. Chukreev, International Cooperation for Compilation and Evaluation of the Data on Charged Particle Nuclear Reaction, Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Jülich, Germany, May 1991, S. 840, S. M. Qaim (HRGB), Springer Verlag, Berlin (1992).
- [34] J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon Press, New York (1985).
- [35] A. Möslang, Kernforschungszentrum Karlsruhe, private Mitteilung.
- [36] H. Feshbach, A. Kerman and S. Koonin, Statistical Multistep Compound and Statistical Multistep Direct Models of Nuclear Reactions, Ann. Phys. (NY), 125, S. 429 (1980).
- [37] Proc. Specialist's Meeting on Preequilibrium Nuclear Reactions, Semmering, Austria, February 1987, Report NEANDC-245 'U', B. Strohmaier (HRGB), OECD, Paris (1988).
- [38] Proc. Specialist's Meeting Use of the Optical Model for the Calculation of Neutron Cross Section Below 20 MeV, Paris, France, November 13-15, Report NEANDC-222, OECD (1986).
- [39] Proc. Specialist's Meeting on Nuclear Level Densities, Bologna, Italy, November 1989, G. Reffo, M. Herman and G. Maino (HRGB), World Scientific, Singapore (1992).
- [40] M. Blann and J. Bisplinghoff, Code ALICE/Livermore 82, Report UCID-19614, LLNL, Livermore (1982).
- [41] M. Blann and H. K. Vonach, Global Test of Modified Precompound Decay Models, Phys. Rev. C, 28, S. 1475-1492 (1983).
- [42] M. Blann, Code ALICE/85/300, Report UCID-20169, LLNL, Livermore (1984).
- [43] M. Blann, Hybrid Model for Pre-Equilibrium Decay in Nuclear Reactions, Phys. Review Letters 27, S. 337-340 (1971).
- [44] M. Blann, Importance of the Nuclear Density Distribution on Pre-Equilibrium Decay, Phys. Review Letters 28, S. 757-759 (1972).
- [45] V. F. Weißkopf and D. H. Ewing, On the Yield of Nuclear Reactions with Heavy Elements, Phys. Review 57, S. 472-485 (1940).

- [46] E. Daum, Theoretische und experimentelle Untersuchungen zur Schädigung und Aktivierung von natürlichem Eisen unter Bestrahlung mit höherenergetischen leichten Ionen, Dissertation, Universität Karlsruhe, Karlsruhe (1996).
- [47] H. Sibum und G. Stein, Titan - ein Werkstoff für eine umweltschonende Technik der Zukunft, Metallische Werkstoffe für eine umweltschonende Technik der Zukunft, Ergebnisse der Werkstoff-Forschung Bd. 5, M. O. Speidel und P. J. Uggowitzer (HRGB), Verlag << Thubal-Kain >>, auch Verlag der Schweizerischen Akademie der Werkstoffwissenschaften, S. 31 ff. (1992).
- [48] J. W. Davis, M. A. Ulrickson, R. A. Causey, Use of Titanium in Fusion Components, Fusion Reactor Materials, Proc. Sixth Int. Conf. on Fusion Reactor Materials (ICFRM-6), Stresa, Lago Maggiore, Italy, September 27-October 1, 1993, Part A, D. G. Rickerby, H. Stamm, K. Ehrlich, M. Victoria (HRGB), Elsevier Science B.V., Journal of Nuclear Materials 212-215 Part A, S. 813-817 (1994).
- [49] M. Rühle, Vanadinlegierungen für die Kerntechnik, Teil I, Einführung - Herstellung von Halbzeugen, Metall-Heft 2, S. 140-147 (1979).
- H. U. Borgstedt, Vanadinlegierungen für die Kerntechnik, Teil II, Korrosionsbeständigkeit von Vanadinlegierungen in flüssigen Alkalimetallen, Metall-Heft 3, S. 265-266 (1979).
- M. Schirra, Vanadinlegierungen für die Kerntechnik, Teil III, Zeitstandfestigkeits- und Kriechverhalten von Vanadin-Basis-Legierungen, Metall-Heft 5, S. 455-465 (1979).
- [50] Assessment of Vanadium Alloys for ITER Application, Report prepared under Action 1 of the 3rd EC Blanket/Structural Materials meeting, 29 April, 1993, W. van Witenburg, B. van der Schaaf (HRGB), Report ECN-RX--93-082, ECN Petten, Niederlande (September 1993).
- [51] E. Fromm und E. Gebhardt, Gase und Kohlenstoff in Metallen, Springer, Berlin (1976).
- [52] K. Ehrlich, S. Kelzenberg, H.-D. Röhrig, L. Schäfer, M. Schirra, The Development of Ferritic-Martensitic Steels with Reduced Long-Term Activation, Fusion Reactor Materials, Proc. Sixth Int. Conf. on Fusion Reactor Materials (ICFRM-6), Stresa, Lago Maggiore, Italy, September 27-October 1, 1993, Part A, D. G. Rickerby, H. Stamm, K. Ehrlich, M. Victoria (HRGB), Elsevier Science B.V., Journal of Nuclear Materials 212-215, S. 678-683 (1994).
- [53] P. Fenici, H. W. Scholz, Advanced Low-Activation Materials. Fibre-Reinforced Ceramic Composites, Fusion Reactor Materials, Proc. Sixth Int. Conf. on Fusion Reactor Materials (ICFRM-6), Stresa, Lago Maggiore, Italy, September 27-October 1, 1993, Part A, D. G. Rickerby, H. Stamm, K. Ehrlich, M. Victoria (HRGB), Elsevier Science B.V., Journal of Nuclear Materials 212-215, S. 60-68 (1994)
- [54] M. Schirra, P. Graf, S. Heger, H. Meinzer, W. Schweiger, H. Zimmermann, MANET II, Untersuchungsergebnisse zum Umwandlungs- und Vergütungsverhalten und Prüfung mechanischer Eigenschaften, Report KfK 5177, Kernforschungszentrum Karlsruhe (Mai 1993).
- [55] K. Anderko, K. Ehrlich, L. Schäfer, M. Schirra, CETA, ein Entwicklungsschritt zu einem schwach aktivierbaren martensitischen Chromstahl, Report KfK 5060, Kernforschungszentrum Karlsruhe (Juni 1993).
- [56] K. Ehrlich, M. Schirra, Institut für Materialforschung, Forschungszentrum Karlsruhe, private Mitteilung (1993).

- [57] G. J. Butterworth, Low Activation Structural Materials for Fusion, Fusion Engineering and Design 11, S. 231-244 (1989).
- [58] A. Hishinuma, D. R. Harries, Japanese Atomic Energy Research Institute JAERI, Tokai-mura, private Mitteilung, (1994).
- [59] Production of High-Purity Vanadium, Chromium and Titanium for Use in Low Activation Materials, Report Euratom Contract NET/89-797, Johnson Matthey, Royston, UK (1993).
- D. Murphy and G. J. Butterworth, Production of High-Purity Vanadium, Chromium and Titanium for Use in Low Activation Materials, Journal of Nuclear Materials 191-194, S. 1444-1449 (1992).
- [60] G. J. Butterworth and C. B. A. Forty, The Significance of Sequential Charged Particle Reactions in the Activation of Vanadium Alloys, Fusion Reactor Materials, Proc. Sixth Int. Conf. on Fusion Reactor Materials (ICFRM-6), Stresa, Lago Maggiore, Italy, September 27-October 1, 1993, Part A, D. G. Rickerby, H. Stamm, K. Ehrlich, M. Victoria (HRGB), Elsevier Science B.V., Journal of Nuclear Materials 212-215, S. 628-634 (1994)
- [61] J.-Ch. Sublet and G. J. Butterworth, Fusion Activation of Ferrous Alloys - Dependence on Flux, Irradiation Time and Fluence, Fusion Engineering and Design 22, S. 279-321 (1993).
- [62] S. Kelzenberg, S. Cierjacks, P. Obložinský and J. Kaneko, Integral Data Testing of Critical Activation Cross Sections for Fusion Materials Development at the Karlsruhe Isochronous Cyclotron; Proceedings of a Topical Conference on Nuclear Data for Fusion Reactor Technology Kernforschungszentrum Karlsruhe, 23rd October 1991, NEANDC-307 'U', INDC(Ger)-035/L, KfK 5062, S. 37 (April 1992).
- [63] Gamma Vision®, Gamma-ray Spectrum Analysis and MCA Emulation for Microsoft Windows 3.x, A66-BI, Software User's Manual; EG & G ORTEC, USA.
- [64] S. Cierjacks and K. Shibata, Blind Intercomparison of Nuclear Models for Preceding Charged Particle Emission, Report NEA/NSC/DOC(93)4, OECD Nuclear Energy Agency, Paris (1994).
- [65] U. Reus and W. Westmeier, Catalog of Gamma Rays from Radioactive Decay, Atomic Data and Nuclear Data Tables, Vol.29, S. 1-406 (1983).
- [66] G. W. Schweimer, Fast Neutron Production With 54 MeV Deuterons, Nuclear Physics A100, S. 537-544 (1967).
- [67] R. A. Forrest and J.-Ch. Sublet, FISPACT 4 User Manual, EASY Documentation Series, UKAEA FUS 287, Issue 2, (July 1995).